

主任指導教員：尾関之康 教授

フラストレートしたハイゼンベルグ系
を中心としたトポロジカル相転移の
動的スケーリング解析

電気通信大学大学院情報理工学研究科
基盤理工学専攻

1733086

飛世 峻吾

平成31年1月22日

目次

第I部	序論	1
第1章	イントロダクション	2
1.1	研究背景	2
1.1.1	統計物理学と計算機シミュレーション	2
1.1.2	トポロジカル相転移	2
1.1.3	2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型の相転移	3
1.2	研究の概要	4
第II部	本論	6
第2章	模型とトポロジカル相転移	7
2.1	フラストレートした2次元格子	7
2.2	2次元連続スピン系における相転移	8
2.2.1	XY模型	9
2.2.2	ハイゼンベルグ模型	12
第3章	計算シミュレーション	16
3.1	モンテカルロ法	16
3.2	熱浴法	16
3.3	非平衡緩和法	19
3.4	その他の手法・条件	19
第4章	動的スケーリング解析	20

4.1	相転移の緩和における振る舞い	20
4.2	動的スケーリング解析	21
4.2.1	改良された動的スケーリング解析	22
4.2.2	緩和時間 τ の関数形の無仮定と相転移の識別	24
4.2.3	動的スケーリング解析のその他の改良	24
第5章	シミュレーションと解析の結果	25
5.1	非平衡緩和法による測定結果	26
5.2	動的スケーリング解析	27
第6章	その他のシミュレーションと解析	35
6.1	サブラティス磁化	35
6.2	フラストレート正方格子	37
6.3	境界部分の緩和	39
6.3.1	Ising模型	39
6.3.2	XY模型	42
6.3.3	ハイゼンベルグ模型(パターン1)	46
6.3.4	ハイゼンベルグ模型(パターン2)	53
第7章	転移温度下における臨界指数	59
7.1	ゆらぎの緩和	59
7.2	臨界指数 z 、 η の結果と考察	62
第III部	結論	64
第8章	まとめ	65
8.1	結論	65
8.2	今後の課題	67
謝辞		86
参考文献		87

第I部

序論

第1章

イントロダクション

1.1 研究背景

1.1.1 統計物理学と計算機シミュレーション

ミクロな基本原理からマクロな物理法則を導出することが統計物理学の本質となる。物質の相が条件により別の相に移る現象を相転移といい、最もわかりやすい例としては液体の水(液相)が水蒸気(気相)あるいは氷(固相)へと変化するといったことが挙げられる。相転移は磁性体においても磁気モーメント（スピン）同士の相互作用と温度の変化によって引き起こされる現象の典型で、その臨界状態における転移温度などの厳密解は計算機がない時代より様々な手法を以て理論計算されてきた。しかし相転移を引き起こす磁性体模型を手計算だけで厳密に扱うには限界があった。その後、計算機の発展とともにスピントリッパの計算シミュレーションができるようになり、より正確な解を求められるようになった。しかしながら未だに多くの磁性体模型の厳密解は求まっておらず、特に分子間相互作用が複雑であるケースにおいては正しい解が算出されにくい。平衡状態になるまで計算シミュレーションを行う方法（平衡MC法）は主流である手法の一つであるが、模型によっては問題点が多いため、これを克服するための多くの方法が考えられてきた。そうした従来の問題を解決し、様々な模型への汎用性が高いと期待されている手法の一つが非平衡緩和法[1]であり、本研究の軸にもなっている。

1.1.2 トポロジカル相転移

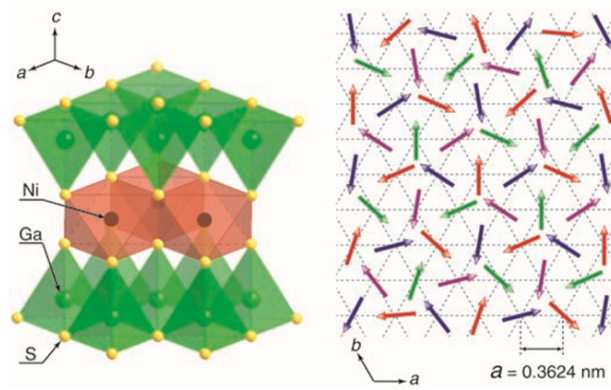
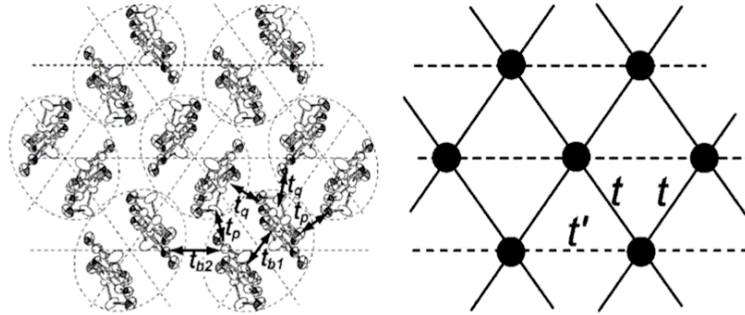
2016年ノーベル物理学賞は「トポロジカル相転移および物質のトポロジカル相の理論的発見」の業績によって、David J. Thouless氏、F. Duncan M. Haldane氏、J. Michael

Kosterlitz氏の3氏に贈られた[2, 3]。トポロジーとは位相幾何学とも呼ばれる数学的概念で、連続的变化に影響されない図形の不変な指標（例えば穴の数）に着目するという概念である。トポロジーは1970年初めには超電導の考察に、また1980年代には量子ホール効果の解明に用いられ、相や相転移における新しい存在の示唆や概念そのものの拡大に大きく貢献することとなった。3氏の研究により、実質的に1次元と見なせる鎖状の系、あるいは実質的に2次元と見なせる系(磁性体、超流動体、超伝導体の薄膜など)においてトポロジー的な（トポロジカルな）相転移現象が起こることが理論的に示された。この相転移はKosterlitz・Thouless転移（K T転移）と呼ばれ、この転移の理論においては渦状の励起（ボルテックス）がトポロジー的存在として役割を果たす。現在では1次元や2次元の系にとどまらず、トポロジカル金属、トポロジカル超伝導体、トポロジカル絶縁体など3次元物質においても研究が進展している。よってトポロジカル相転移の臨界現象の解析は、新しい高性能電子デバイスの開発やエレクトロニクス・超電導技術への応用など、物質科学の進歩にも繋がると期待される。

1.1.3 2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型の相転移

詳細が解明されていない模型の一つに2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型が挙げられる。ハイゼンベルグ模型とは統計物理学の解析に用いられる模型の一種で、スピンの向く方向は三次元球を描く（詳細は第2章にて述べる）。本模型においては二値のトポロジカル量子数とみなされるトポロジー的に安定した点欠陥（ Z_2 ボルテックス）が生じ、この解離・凝縮が前節で述べたKT転移のようなトポロジカル相転移を引き起こすと提案されてきた[4, 5]。しかしこの系は緩和するまでの時間が非常に長いため、通常の平衡モンテカルロ法での解析は困難を極めた。そのため四半世紀以上にも渡って研究が進められてきたが、 Z_2 ボルテックスが引き起こすとされている相転移の有無は現在においても未だ完全な決着と至っておらず[6]、統計物理学における難題の一つとなっている。

本系の実在する物質として、 NiGa_2S_4 [7, 8, 9, 10, 11]や $\kappa - (\text{ET})_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$ [12]、 NaCrO_2 [13, 14]、 $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ [15]などが存在し、実験的アプローチも進められている[16]。本研究では、図1.1や図1.2の右図で現されるようなスピン構造について考える。

図1.1 NiGa_2S_4 [7]図1.2 $\kappa - (\text{ET})_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$ [12]

1.2 研究の概要

本研究の目的はフラストレートした2次元ハイゼンベルグ模型におけるトポロジカル相転移の解析をし、その相転移の確認および転移温度の推定や臨界指数の振る舞いを調べることである。特に、2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型の相転移の解析に重点を置いている。前節で述べた本系の解析における問題を克服するために、フラストレート系や大きな系に対しても効果的であることが実証されている非平衡緩和法を用いて解析を進めた。オーダーパラメータとして、120度構造(図2.11)の剛性と方向を示すパラメータであるベクトルカイラリティを計算した。このベクトルカイラリティが \mathbb{Z}_2 ボルトックスを形成していると示唆されている。

この解析において、より正確なデータを得るためには十分な数のサンプルと、より大きい模型サイズが求められるため、東京大学・物性研究所の共同利用のサーバー[17]を使

用してMPIによる並列計算を行うことで効率化を図った。そして、その結果を用いて動的スケーリング解析を行った。動的スケーリング解析を行うにあたっては、非平衡緩和法で得られたデータから変換されたデータ点がスケーリング関数上に正しく乗っているかどうかの評価が必要となる。従来の動的スケーリング解析ではこのスケーリング関数に対して多項式の関数形を仮定する必要があった。しかし改良された動的スケーリング解析法[18, 19]ではプログラムにカーネル法を取り入れたことにより、関数形の仮定をしなくてもスケーリングができるようになった。また、すべての温度データをまとめて処理できるようになったため、解析の計算時間そのものの高速化も図られた。この動的スケーリング法は、近年の研究を例に挙げると、2次元三角格子反強磁性XY模型の解析において転移温度の新しい普遍性クラスを示す功績を出しており[20, 21]、本模型においても信頼性のある結果の算出が期待される。(～第5章)

またその結果の議論を深めるべく、別のオーダーパラメータの計算や、同じ普遍性を持つと予想されるフラストレート正方格子ハイゼンベルグ模型の解析、初期条件を半分に分けその境界部分の変化を調べるなど、様々なアプローチを試みた。(第6章)

さらに、2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型においては、得られた転移温度より低温におけるゆらぎの量の解析をし、各温度における臨界指数を評価した。(第7章)

第II部

本論

第2章

模型とトポロジカル相転移

格子上に向きのあるスピン(磁気モーメント)を分布することで、磁性体を単純化して図示する。図2.1や図2.4のような2次元格子上のスピン間における相互作用について考える。

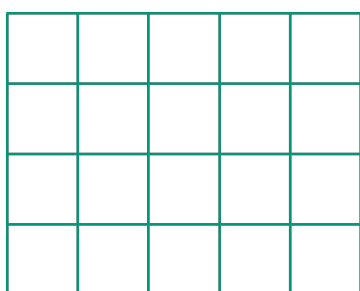


図2.1 2次元正方格子

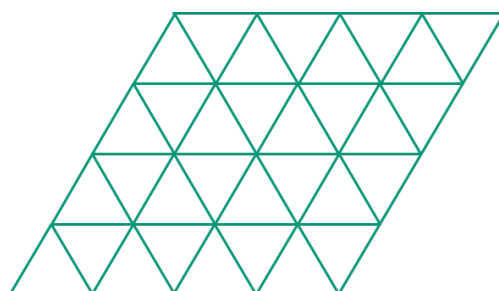


図2.2 2次元三角格子

2.1 フラストレートした2次元格子

強磁性はすべてのスピンが同じ方向を向こうとする磁性、反強磁性はスピンとその最近接のスピンがそれぞれ反対の方向に向くよう作用するといった磁性である。簡単な例としてIsing模型におけるスピンの振る舞いについて考える。Ising模型は磁性体の模型における最もシンプルなモデルの一つで、スピンの向く方向は上($S_i = 1$)か下($S_i = -1$)の2種類のみとなっており、次のようなハミルトニアンで表される。

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (2.1)$$

ここで S_i は磁気モーメントの大きさを表し、またこの J (定数)が正ならば強磁性的な、負ならば反強磁性的な振る舞いをする。三角格子におけるこの模型の基底状態について考

える。1つのブラケットのみ取り出してみるとスピンの向きは図2.3のようになる。

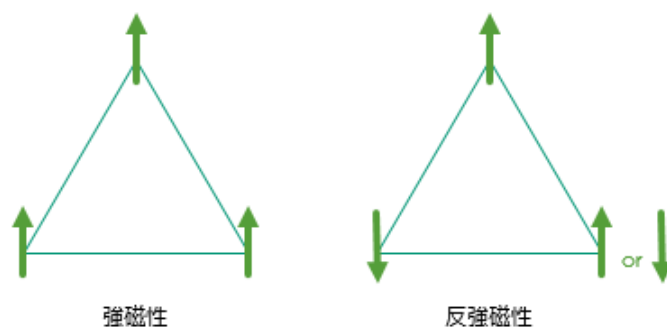


図2.3 2次元三角格子Ising模型における強磁性、反強磁性

このとき、強磁性ではすべてのスピンの向きが同じ方向で安定するが、反強磁性においては2つの向きを決めたとき最後の1つの向きを決めることが不可能となる。この反強磁性三角格子Ising模型のように、基底状態においてエネルギー的に決めることができない現象をフラストレーションという。

2.2 2次元連続スピン系における相転移

本研究の目的はフラストレートしているハイゼンベルグ模型の相転移の解析であるが、その足掛けとして同じ2次元連続スピン系であるX Y模型の相転移についても触れる。X Y模型は平面回転子（図2.4）、ハイゼンベルグ模型は球面回転子（図2.5）である。これら2次元連続スピン系は、マーミンワグナーの定理により、（反）強磁性転移は起きないことが示されている。しかし相転移そのものは起こるとされており、それをまとめたのが表2.1である。これらそれぞれについて、詳しく述べていく。

表2.1 2次元連続スピン系における相転移

2次元三角格子	X Y模型	ハイゼンベルグ模型
強磁性	K T転移	なし
反強磁性	カイラル転移・K T転移	Z_2 ボルテックス転移(?)

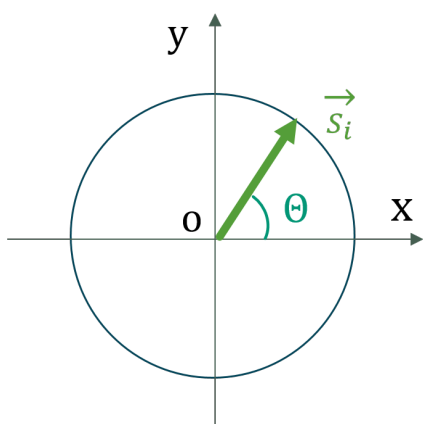


図2.4 X Y 模型

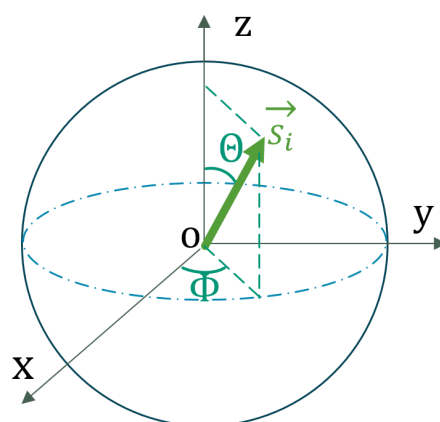


図2.5 ハイゼンベルグ模型

2.2.1 X Y 模型

平面回転子であるので、 i 番目のスピンの向きは、

$$\vec{S}_i = (\cos \theta_i, \sin \theta_i) \quad (2.2)$$

ただし $0 \leq \theta < \pi$ である。また、ハミルトニアンは式(2.3)のとおりである。

$$\mathcal{H} = |J| \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (2.3)$$

ここで J は定数、 θ_j は最近接スピンの角度である。

K T 転移 (例：2次元三角格子強磁性X Y 模型)

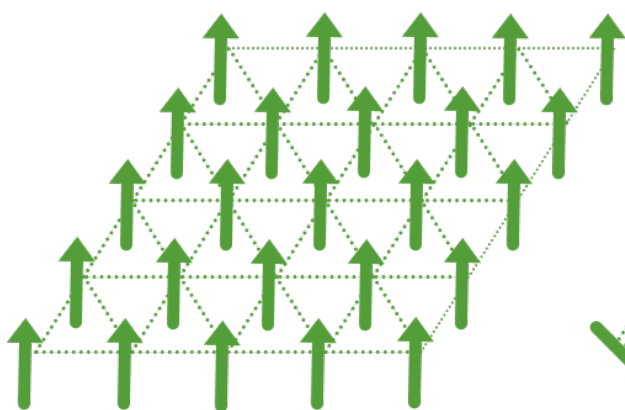


図2.6 基底状態

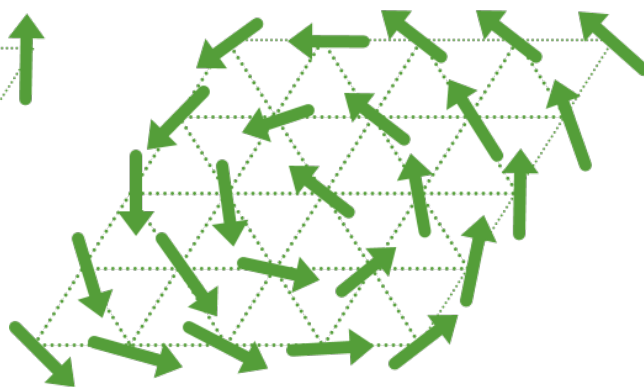


図2.7 渦を巻く様子

2次元三角格子強磁性XY模型は図2.6のような基底状態を取り、すべてのスピンの向きが揃いつつ同じ方向を向こうとするが、温度変化により少しずつずれができ、やがて渦（ボルテックス）が生じる（図2.7）。この渦がトポロジカルな相転移であるKT転移を引き起こす。フラストレートXY模型においては次のスピン配向秩序パラメータを計算することで、KT転移を確認することができる。

$$m(t) = \frac{1}{N} \sum_i (\cos [\theta_i(t) - \theta_i^0]) \quad (2.4)$$

ここでNはスピン数、 θ_i^0 は初期条件におけるスピンの向きを示す。

KT転移のようなトポロジカル相転移の渦についての性質についてもう少し説明する。まずトポロジカル相転移とは秩序変数の対称性が破れないけど、渦により引き起こされる相転移のことである。渦とはKT転移で言えば先ほどの図2.7のようにスピンの向きが形成する。しかしこの渦はKT転移の低温相においては、単体ではなく必ず対になってあらわれる。図で示すと、先ほどの図2.7のような渦が図2.8における左の渦のように発生したとき、エネルギーを下げるために右のようなアンチ渦もまた発生しペアとなる（束縛）。

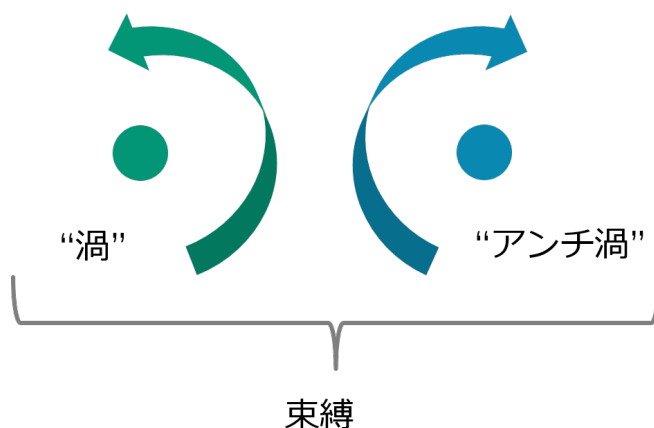


図2.8 KT転移の低温相における渦の束縛

ところが高温相になるとそのペアは解離し、図2.9のようにペアは解離を起こす。つまり、格子の各地に孤立した渦が発生することになる。

カイラル転移（例：2次元三角格子反強磁性XY模型）

2次元三角格子反強磁性XY模型は図2.10のように2種類の基底状態をとる（二重縮退）。スピンの向きが時計回りの基底状態を+、反時計回りのものを-と表記している。この二種類の基底状態は回転や全反転で重ならず、鏡映で重なる。この2重縮退（ Z_2 対



図2.9 K T転移の高温相における渦の解離

称性) が破れるとき、カイラル転移という相転移が起こる。これは、カイラル秩序パラメータ

$$\kappa(t) = \frac{a}{N} \sum_{\langle i \rightarrow j \rangle} (\sin [\theta_i(t) - \theta_j(t)]) \quad (2.5)$$

の計算結果より見られる。ここで a は $a = 1/\sqrt{2}$ または $a = 2/\sqrt{3}$ の正規化係数である。

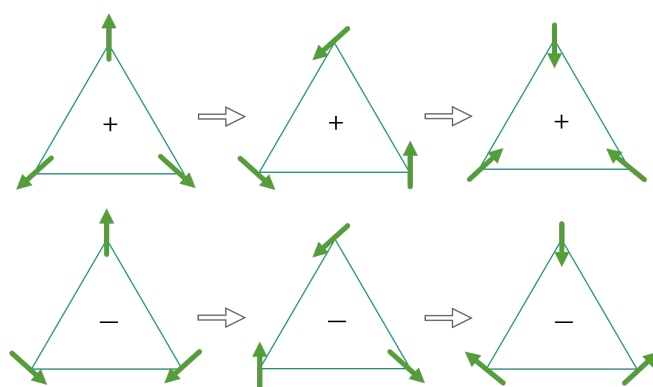


図2.10 2重縮退

また120度構造(図2.11)の回転自由度により渦が生じるため、KT転移も発生する。なお、これら2つの転移温度は一致するわけではなく、温度の変化により順に生じる。[20]

フラストレート正方格子XY模型

正方格子は、単純にすべてを反強磁性にしたところでフラストレートは起こらない。しかし、格子の行を強磁性の行と反強磁性の行と交互にすることで、フラストレートを起こすことができる。このとき基底状態は図2.12となる。ここで重要なのは、XY模型においてはこのフラストレート正方格子と反強磁性三角格子は同じ普遍性を持つといった

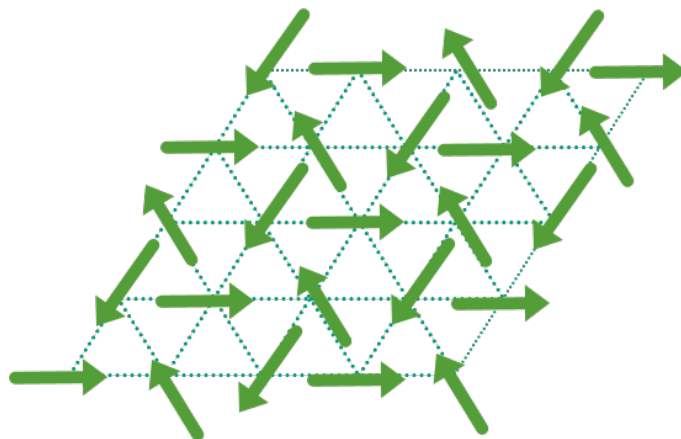


図2.11 基底状態（120度構造）

結果が出ていることである[20, 21]。

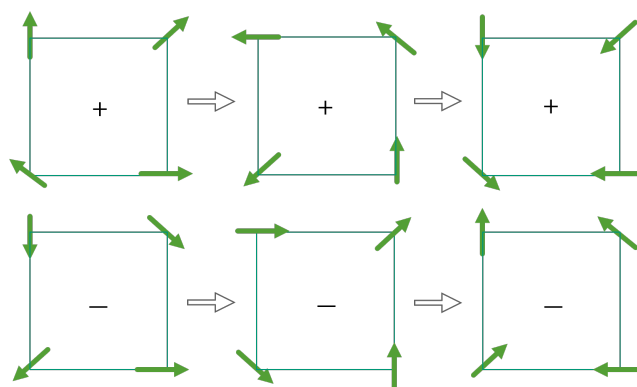


図2.12 2重縮退

2.2.2 ハイゼンベルグ模型

球面回転子であるので、 i 番目のスピンの向きは極角 θ と方位角 ϕ を用いて、

$$\vec{S}_i = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (2.6)$$

と表される。ただし $0 \leq \theta < \pi, 0 \leq \phi < 2\pi$ である。またハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.7)$$

となる。ここで J は定数、 \vec{S}_j は最近接スピンである。

ベクトルカイラリティー

スピンの回転の指標としてベクトルカイラリティー $\vec{\kappa}$ があり式(2.8)で計算される。これは前述の120度構造の剛性と方向を示すパラメータとなる。

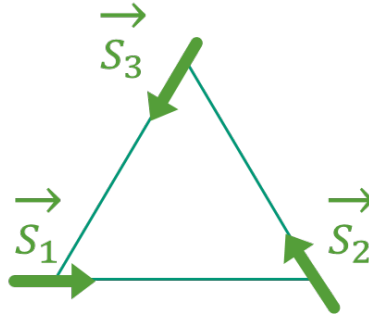


図2.13 ベクトルカイラリティーの取り方

$$\vec{\kappa} = \vec{S}_1 \times \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \times \vec{S}_3 + \vec{S}_3 \times \vec{S}_1 = (\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z) \quad (2.8)$$

 Z_2 ボルテックス転移（2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型）

本題である、2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型における相転移について説明する。XY模型においてベクトルカイラリティーはZ成分のみの変化であった。しかし、ハイゼンベルグ模型はベクトルカイラリティーもまた球面回転子となる。よって2重縮退の破れが生じないためカイラル転移は起きない。しかし一方で、 Z_2 ボルテックス転移と呼ばれるトポロジ的な相転移が示唆されている。 Z_2 ボルテックスとはベクトルカイラリティーによって形成されたボルテックスのことで、この Z_2 ボルテックスの束縛、非束縛が相転移を引き起こすとされている（図2.8,2.9のような渦を、格子上のスピンではなく Z_2 ボルテックスが形成する）。

XY模型などにおける通常のKT転移と、本研究対象である Z_2 ボルテックス転移との違いについて触れる。異方性の三角格子強磁性XY模型では、図2.14のように格子上のスピンが連続変形では消せない（図の右巻きと左巻きは連続変形で移り変わることができない）トポロジカルな励起を引き起こす。なお、異方性のない強磁性ハイゼンベルグ模型では連続変形によりこれを消すことができる。

しかし一方で三角格子ハイゼンベルグ模型における Z_2 ボルテックスは、図2.14における右巻き・左巻きの状態を、x軸周りの π 回転で連続的に移り変わることができる。ここで本系において図の矢印はスピンではなくベクトルカイラリティーであることに注意する。

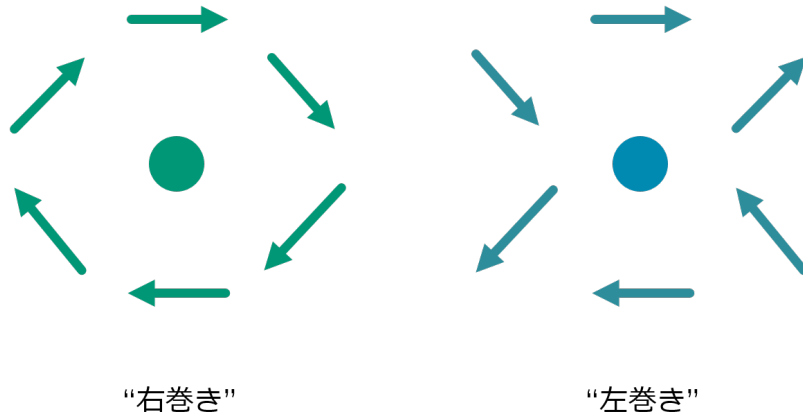


図2.14 渦励起（図の矢印は三角格子XY模型においてスピン、反強磁性三角格子ハイゼンベルグ模型においてベクトルカイラリティを表す）

すなわち、この右巻き・左巻きの概念がない、2値で特徴づけられる Z_2 対称性となっている。

次にKT転移と Z_2 ボルテックス転移の相図について考える[24]。KT転移は図2.15のように1つの長さスケールしかなく、低温相で相関長は発散する。一方の Z_2 ボルテックス転移は図2.16のように2つの長さスケールがあり、クロスオーバーが起こると示唆されている。ここで、

$$\xi_v \sim \exp[A/(T - T_v)^\alpha] \quad (T \gg T_v) \quad (2.9)$$

とされており、低温においてそれが有限で発散するかわからない。そして転移温度 T_v 下では

$$\xi_s \sim \exp(\beta/T) \quad (T \ll T_v) \quad (2.10)$$

であり低温相でもスピン相関関数は指数関数的に減衰する。そして相転移近傍では、

$$\xi \sim \frac{\xi_v \xi_s}{\xi_v + \xi_s} \quad (2.11)$$

となり、真性特異点があるとされる。

Z_2 ボルテックス転移もまた、低温相では渦対のみ存在、高温相では自由な渦が発生するとされている。しかし Z_2 ボルテックス転移にはまだまだ解明されていない点が多く、そもそもこのような相転移が存在するかもしれないかの話そのものにまだ決着が付いておらず課題となっている。有限サイズスケーリングによる計算にて予測されている結果は次の表2.2のとおりであるが、サイズ依存性の問題を克服できていないため厳密な解とまでは言い切れないとされている。

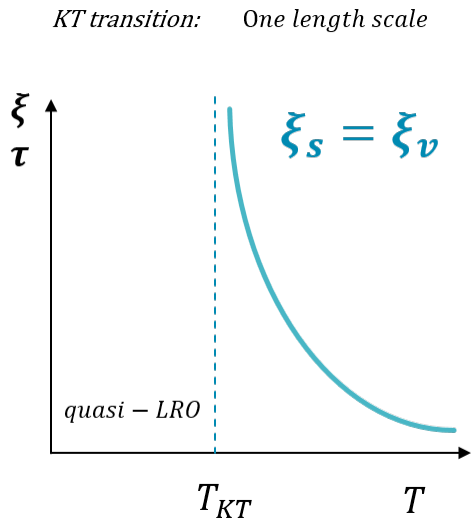
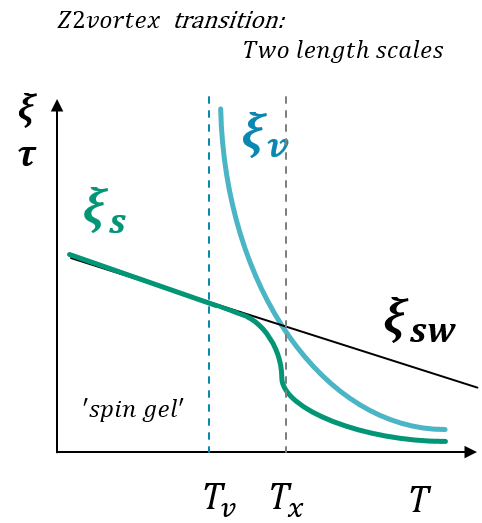


図2.15 K T転移

図2.16 Z_2 ボルテックス転移表2.2 転移温度 T_c の参考文献

Method	year	相関長	T_c
MC[4]	1984	$L \leq 36$	0.31 ± 0.01
MC[5]	2010	$L \leq 1536$	0.285 ± 0.005

平衡MC法による解析が困難になる原因として、渦とスピンの2つの長さスケールが存在、スピン相関の長さスケールが数千格子間隔であることが挙げられる。つまり、これまで計算された結果は有限サイズによる疑似的な秩序なのか、真の相転移であるのかその判別をつけることが未だにできていない。表2.2よりも近年の平衡MC法における最新の研究結果では、京コンピュータなどが用いられ $L = 16384$ での計算も行われたが、まだサイズが小さく、トポロジカル相転移の有無は結論付けられないと言及された。[6][23]

そこで本研究ではサイズ依存性による影響を回避した方法とされる非平衡緩和法を用いてその問題を克服し、相転移の存在の確認やその振る舞いの解析をすることを目的とする。

第3章

計算シミュレーション

この章では研究における計算機シミュレーション及びそれに伴い用いたアルゴリズムや技法などの具体的な説明を提示する。

3.1 モンテカルロ法

乱数を利用して数値計算やシミュレーションを進める方法であるモンテカルロ法によって計算解析をする。これはモンテカルロシミュレーションと呼ばれる。このモンテカルロ法は簡単な例では円周率 π の算出に使われもする。一般に物理量は系が平衡状態であるときの測量である。モンテカルロ法を用いて模型のスピンの状態を更新していくことで平衡状態に近づける。この概念は時間発展と呼ばれている。スピンの状態の更新におけるアルゴリズムは、シミュレーションの効率化や時間短縮のために様々な方法が考案されてきた。本研究では熱浴法というアルゴリズムを用いた。これは節3.2にて詳しく述べる。

3.2 熱浴法

熱浴法は、モンテカルロ法での時間発展におけるシングルスピンフリップダイナミクス of アルゴリズムの1つである。

メトロポリス法と熱浴法

時間発展におけるスピンの更新にて用いられるアルゴリズムの中で代表的なものの一つとしてメトロポリス法が挙げられる。これは格子上のすべてのスピンを一つ一つ調べ、スピンを反転させるかを決定するというものである。このとき対象のスピンの最近

接のスピンとのエネルギー差を計算し、乱数と比較するといった基準を設ける。

一方の熱浴法はスピンの新しく向く方向に重みを置いているため、メトロポリス法の時に必要であったスピンを反転させるかの判定は不必要となる。一般的にハイゼンベルグ模型においては熱浴法を用いたほうがメトロポリス法を用いた時と比べ計算時間が短縮されるためこちらを用いる。

熱浴法の原理

以下ではハイゼンベルグ模型における熱浴法の原理について述べる[22]。ハイゼンベルグ模型のスピンは式(2.6)で示した通り極角 θ と方位角 ϕ の2変数で表される。すなわち熱浴法でスピンの次に向く方向の極角 θ と方位角 ϕ を指示するための式を導出する。まず、確率遷移 $P(x)$ はボルツマン定数に比例するので式(3.1)で表される。

$$P(x) \propto e^{-\beta \mathcal{H}} = e^{\frac{\sum_j J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{T}} \quad (3.1)$$

$$= e^{\frac{\sum_j J_{ij} |\vec{S}_j| \cos \theta}{T}} \quad (3.2)$$

ここで、 T は温度である（単位は無次元量 $k_B T/J$ ）。スピンの大きさは1であるので式(3.1)で内積をとったときに現れる $|\vec{S}_i|$ は1となる。総和の方向を z 軸とするので長さ $x = \cos \theta$ となる。また、式(3.2)において

$$H = \left| \frac{\sum_j J_{ij} \vec{S}_j}{T} \right| \quad (3.3)$$

とし、定数 A を用いて表すと式(3.2)は

$$P(x) = A e^{Hx} \quad (3.4)$$

と書ける。 $P(x)$ を積分で表すと、 $P(x)$ は確率なので総和は1、範囲は $0 \leq \theta \leq \pi$ より $-1 \leq \cos \theta \leq 1$ となるので、

$$\int_{-1}^1 P(x) dx = 1 \quad (3.5)$$

となる。式(3.4)を代入して積分を解くと、

$$\int_{-1}^1 A e^{Hx} dx = 1 \quad (3.6)$$

$$\frac{A}{H} e^H - \frac{A}{H} e^{-H} = 1 \quad (3.7)$$

$$\frac{A}{H} e^{-H} (e^{2H} - 1) = 1 \quad (3.8)$$

となるので定数Aは式(3.9)となる。

$$A = \frac{H}{e^{-H}(e^{2H} - 1)} \quad (3.9)$$

算出した式(3.9)を式(3.4)に代入すると、

$$P(x) = \frac{H}{e^{-H}(e^{2H} - 1)} e^{Hx} \quad (3.10)$$

$$= \frac{H}{e^{2H} - 1} e^{H(x+1)} \quad (3.11)$$

となる。P(x)は確率なので、乱数 R_1 を用いて式(3.12)のように書き直せる。ただし $0 < R_1 < 1$ である。

$$R_1 = \int_x^{-1} P(x) dx \quad (3.12)$$

式(3.12)に式(3.11)を代入して式変形をしていくと、

$$R_1 = \int_x^{-1} \frac{H}{e^{2H} - 1} e^{H(x+1)} dx \quad (3.13)$$

$$= \frac{1}{e^{2H} - 1} (e^{H(x+1)} - 1) \quad (3.14)$$

$$e^{H(x+1)} = R_1(e^{2H} - 1) + 1 \quad (3.15)$$

式(3.15)で両辺の対数を取ると、

$$H(x+1) = \ln(R_1(e^{2H} - 1) + 1) \quad (3.16)$$

よってxは、

$$x = \frac{1}{H} \ln(R_1(e^{2H} - 1) + 1) - 1 \quad (3.17)$$

となり、 $x = \cos\theta$ であるので極角 θ が求まる。内積は極角 θ が決まれば方位角 ϕ は自由であるので、乱数 R_2 を用いて

$$\phi = 2\pi R_2 \quad (3.18)$$

と表される。ただし $-1 < R_2 < 1$ である。よって式(3.17)と式(3.18)から更新後のスピンの向きが特定される。ただしこの θ と ϕ は磁場方向をz軸にとったローカルなものであることに注意する。すなわち座標回転をして正しい座標に直す必要がある。

3.3 非平衡緩和法

通常の平衡MC法では動的秩序変数が完全に緩和するまで時間発展させ、物理量を求めるが、非平衡緩和法では緩和過程のデータを平均して解析する方法となっている。シミュレーションを行う以上必ず有限のサイズを決めなければならないが、ステップ数が多くなるにつれ有限サイズ効果といった問題が生じうる。これはモデルのサイズが小さいと結果の振る舞いが悪くなるといった現象で、平衡MC法において大きな課題となりやすい。しかし非平衡緩和法は有限サイズ効果が生じていない緩和過程のデータを用いるため、サイズ依存性に影響されにくい。そのため困難とされているフラストレート系やスピングラスをはじめ、様々な相転移に適用できる。また改良された動的スケーリング解析と組み合わせることで従来と比べ信憑性の高い結果を求められるようになり、近年ではフラストレート系例えばXY模型などにおいて精度向上の結果が得られた[20, 21]。

3.4 その他の手法・条件

プログラムにMPI（Message Passing Interface）を実装した。MPIとはCPU間でメッセージ通信をさせるための命令文のことで、多数のCPUを有している東大物性研サーバーでCPUごとに並行してプログラムを走らせるために用いた。

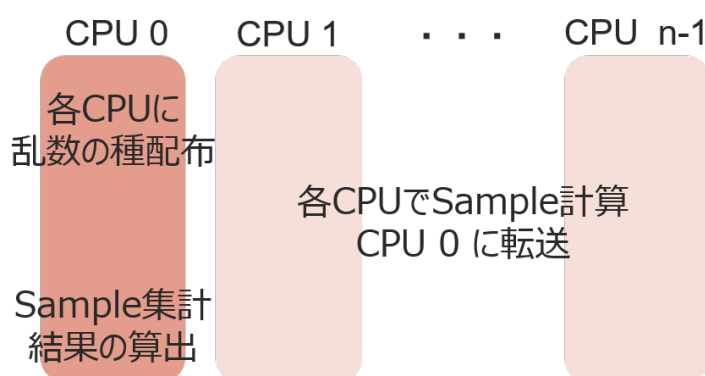


図3.1 Message Passing Interface

また、境界条件はskew boundary conditionで、十分大きな系の緩和を調べることで無限系相当の解析を実現している。乱数生成のサブルーチンにはXOR法を用いた。

第4章

動的スケーリング解析

非平衡緩和法では模型のオーダーパラメーター（秩序変数）が完全秩序状態から緩和するまでの過程を測定した。ここで得られた結果の緩和データから転移温度や動的臨界指数を評価するために、動的スケーリング解析を行う。解析においては、相転移の緩和時間を仮定する必要がある。そこでこの章ではまず、本研究に関連する相転移の性質について述べる。

4.1 相転移の緩和における振る舞い

2次転移

転移点において自由エネルギーの2回微分となるような物理量が発散するような転移を2次転移と呼び、この異常性（発散）こそが臨界現象である。2次転移における磁化のオーダーパラメーター $m(t)$ は、

$$m(t) \sim \begin{cases} \exp(-t/\tau) & (T_c < T) \\ t^{-\lambda_m} & (T = T_c) \\ m_{eq} & (T < T_c) \end{cases} \quad (4.1)$$

となる。ここで t は時刻（ステップ数）、 λ_m は動的臨界指数、 T_c は転移温度、 m_{eq} は自発磁化を表す。また τ は緩和時間であり、2次転移においては次式(4.2)で示される。

$$\tau(T) = a|T - T_c|^{-b} \quad (4.2)$$

すなわち、2次転移において τ は臨界現象に近づくにつれ幂的に発散する。ここで、 a, b はともに定数である。

Kosterlits-Thouless転移(KT転移)

K T相は、相関距離 ξ (相関の伝わる平均距離)が発散しているため常に臨界的である。相関距離はスピンの状態変化が周りに伝わり元のスピンに跳ね返ってくる現象であるゆらぎの大きさを測る物理量のことである。K T転移においては次の2式が成り立ち、転移点の特異性が示される。

$$\xi(T < T_c) = \infty \quad (4.3)$$

$$\xi \sim \exp(c/\sqrt{\epsilon}) \quad (4.4)$$

オーダーパラメーター $m(t)$ の $t \rightarrow \infty$ における漸近的な振る舞いは2次転移における解析を適用することができ、式(4.5)が成り立つ。

$$m(t) \sim \begin{cases} \exp(-t/\tau) & (T_c < T) \\ t^{-\lambda_m} & (T = T_c) \\ t^{-\lambda_m(T)} & (T < T_c) \end{cases} \quad (4.5)$$

K T転移への2次転移の振る舞いは2次転移と同じであるが、指数的に発散する。

$$\tau(T) = a \exp(b/\sqrt{T - T_c}) \quad (4.6)$$

ここで留意することは、本系で示唆されている Z_2 ボルテックス転移はトポロジカル相転移ではあるものの、KT転移とは断言されていない点である。すなわち本系の解析における緩和時間の仮定は、式(4.6)以外にも様々な可能性を踏まえる必要があるということである。

局所指数

式(4.1)(4.5)で示したような、オーダーパラメーター $m(t)$ の対数微分 $\lambda(t)$ を導入する。

$$\lambda(t) = -\frac{d \log m(t)}{d \log t} \quad (4.7)$$

この $\lambda(t)$ は動的臨界指数 λ の局所指数と呼ばれており、 $\lambda(t)$ が一定となるような温度を転移温度として推定することができる。

4.2 動的スケーリング解析

以下の式で仮定されるスケーリング則を利用する。

$$m(t, T) = \tau^{-\lambda} \Psi\left(\frac{t}{\tau}\right) \quad (4.8)$$

この Ψ をスケーリング関数とする。ここで緩和時間 τ は通常、式(4.2)や式(4.6)などで仮定し、スケーリングを行う。非平衡緩和法により得られた、様々な時刻 t や温度 T のデータを以下の式のように変換すると仮定する。

$$\begin{cases} X_i \equiv t_i/\tau_i \\ Y_i \equiv \tau_i^\lambda m(t_i, T_i) \\ E_i \equiv \tau_i^\lambda \delta m(t_i, T_i) \end{cases} \quad (4.9)$$

ここで、 $\delta m(t_i, T_i)$ は $m(t_i, T_i)$ の統計的誤差である。このとき、式(4.8)のスケーリング則が成り立つならば式(4.9)で変換して得られる X_i, Y_i は、すべて $Y_i = \Psi(X_i)$ のようにスケーリング関数上に乗ると考えられる。このようにして臨界指数や転移温度を決定することができる。

4.2.1 改良された動的スケーリング解析

またこの動的スケーリング解析において、近年改良された点[18]についても述べる。従来においては Ψ を多項式と仮定し最小二乗法を用いることにより推定されていたが、本来 Ψ の関数形は不明であるためこの手法はあくまで近似的であるに過ぎないなどの問題があった。そうした従来の問題点を解消すべく、ベイズ推定やカーネル法といった手法が用いられた。

スケーリング則における物理パラメータ $\vec{\theta}_p$ により変換されたデータ Y_i の統計モデル $P(\vec{Y}|\Psi, \vec{\theta}_p)$ を、平均ベクトル $\vec{\Psi}$ と共分散行列 ϵ の多次元正規分布として記述すると、

$$P(\vec{Y}|\Psi, \vec{\theta}_p) \equiv N(\vec{Y}|\vec{\Psi}, \epsilon) \quad (4.10)$$

$$\mathcal{N}(\vec{Y}|\vec{\mu}, \Sigma) \equiv \frac{1}{\sqrt{|2\pi\Sigma|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\vec{Y} - \vec{\mu})^t \Sigma^{-1}(\vec{Y} - \vec{\mu})\right) \quad (4.11)$$

となる。ここで、 $(\vec{Y})_i \equiv Y_i$, $(\vec{\Psi})_i \equiv \Psi(X_i)$, $(\epsilon)_{ij} \equiv E_i^2 \delta_{ij}$ である。これらより、データのパラメータに対する条件付き確率は、

$$P(\vec{Y}|\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) \equiv \int P(\vec{Y}|\Psi, \vec{\theta}_p) P(\Psi|\vec{\theta}_h) d\Psi \quad (4.12)$$

となる。ベイズの定理よりパラメータのデータに対する条件付き確率（事後確率）は、

$$P(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h|\vec{Y}) = P(\vec{Y}|\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) P(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) / P(\vec{Y}) \quad (4.13)$$

と表される。この事後確率を最大とするパラメータの値がベイズ推定における推定値であり、このような推定方法を最大事後確率推定（MAP推定）と呼ぶ。ただし、一般的に

事前分布 $P(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h)$ を予め得ることは難しいため、本研究では一定とする。また、 $P(\vec{Y})$ は事後確率を規格化するための定数と見なせるため、

$$P(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h | \vec{Y}) \propto P(\vec{Y} | \vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) \quad (4.14)$$

となる。このときのMAP推定は尤度 $L(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) = P(\vec{Y} | \vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h)$ を最大化する最尤推定 (ML推定) と同義になる。そのML推定の具体的な計算には対数尤度 $\log L(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h)$ が用いられる。式(4.10)～(4.12)より、事後確率は多次元正規分布で表されるため、対数尤度は

$$\log L(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) \equiv -\frac{1}{2} \log |2\pi\Sigma| - \frac{1}{2}(\vec{Y} - \vec{\mu})^t \Sigma^{-1}(\vec{Y} - \vec{\mu}) \quad (4.15)$$

となる。

スケーリング関数 Ψ をノンパラメトリックに扱うために、カーネル法を用いる。これより Ψ はカーネル関数 $K(X_i, X_j)$ の線形和として書き表すことができ、このときの共分散行列 Σ は、

$$\Sigma = \epsilon + \Sigma' \quad (4.16)$$

$$(\Sigma')_{ij} = K(X_i, X_j) \quad (4.17)$$

となる。式(4.15)～(4.17)に基づくベイズ推定はガウス仮定回帰と呼ばれる。

MAP推定でパラメータの推定値を求めるため、対数尤度のパラメータに対する多次元最適化を行う。ここで、簡単のために $\vec{\mu} = 0$ とし、対数尤度およびそのパラメータによる微分を書き記すと、

$$\log L(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) = -\frac{1}{2} \log |2\pi\Sigma| - \frac{1}{2} \vec{Y}^t \Sigma^{-1} \vec{Y} \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial \log L(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h)}{\partial \theta} = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left(\Sigma^{-1} \frac{\partial \Sigma}{\partial \theta} \right) - \vec{Y}^t \Sigma^{-1} \frac{\partial \vec{Y}}{\partial \theta} - \frac{1}{2} \vec{Y}^t \Sigma^{-1} \frac{\partial \Sigma}{\partial \theta} \Sigma^{-1} \vec{Y} \quad (4.19)$$

となる。これらを利用し、次の手順で最適化する。

- (i) 適当なパラメータについて対数尤度を求める。
- (ii) 各パラメータに関する微分を計算し、パラメータ空間における対数尤度の傾き $\nabla \log L(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h)$ を求める。この値を参考にし、パラメータの移動方向を決定する。
- (iii) 移動方向に沿って対数尤度がより高くなるパラメータを探索し、都度更新する。

以上を繰り返し、対数尤度の最大値、そしてパラメータの推定値を算出する。すなわち最終的な尤度の値が大きいほど最適化がうまく行われていることがわかるので、この値は動的スケーリング解析における結果の指標の一つにもなる。

またパラメータの推定値が求まることから、スケーリング関数をプロットすることができる。ガウス過程回帰より、データ点とは別の新しい入力である、ある X に対する Y の予測分布は、

$$\text{平均 } \mu = \vec{k}^t \Sigma^{-1} \vec{Y} \quad (4.20)$$

$$\text{分散 } \sigma^2 = K(X, X) + E^2 - \vec{k}^t \Sigma^{-1} \vec{k} \quad (4.21)$$

のガウス分布となる。ここで $(\vec{k})_i = K(X_i, X)$ である。したがって、この μ を X についての関数 $\mu(X)$ と考えることで、これが推定されたスケーリング関数となる。

4.2.2 緩和時間 τ の関数形の無仮定と相転移の識別

改良された動的スケーリング法ではカーネル法といった概念が取り入れられた。これにより緩和時間 τ が温度ごとに独立なパラメータとして扱えるようになったため、緩和時間の関数形を仮定しない動的スケーリングも行えるようになった。これにより得られた結果と、関数形を使用したスケーリング解析の結果とを比較して優勢である τ を判断する。これにしがって正しい関数形がわかるので、その模型がどういった相転移現象を起こしているかの識別をすることができる。本模型において予測されている Z_2 ボルテックス相転移はKT転移に類するため、この関数無仮定の比較による結果がKT転移に優勢となることを期待する。

緩和時間 τ の残差

関数無仮定の結果と、それぞれ仮定した関数形の結果の残差は次の式で計算される。

$$r = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M [\ln \tau(T_m) - \ln \tau_m]^2 \quad (4.22)$$

この値が小さいほどより関数無仮定の結果に近いと言え、関数形を識別するための判定に用いられる。

4.2.3 動的スケーリング解析のその他の改良

これまで緩和データは各温度100データとしていたが、これをステップ数の最大値から最小値を引いたものに比例した数のデータを取るようにした。これによりデータを取る際の偏りを改善した。

第5章

シミュレーションと解析の結果

ここに章では主題の一つである、2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型におけるベクトルカイラリティの計算シミュレーション結果とその解析結果について述べる。

模型の初期条件

本章における初期条件はXY平面において120度構造、Z成分は0とする（反強磁性三角格子XY模型の初期条件である図2.10と同じ）。またこの基底状態を満たすようにするために、格子サイズは横が $3n-1$ 、縦は $3n$ (n は自然数)である必要がある（境界部分への配慮）。

オーダーパラメーター（秩序変数）

ベクトルカイラリティ(式(5.1))のZ成分(κ_z)およびその2乗($|\vec{\kappa}|^2$)と、それぞれにおける誤差(式(5.2))を測定した。Z成分を測定するのは、先ほどの初期条件によりベクトルカイラリティがZ軸を向いているため、すなわち緩和過程を計算する非平衡緩和法において適しているためである。また、Z成分と2乗とオーダーパラメータを2種類計算しているのは結果の比較のためである。

$$\begin{aligned}\vec{\kappa} &= \frac{2}{3\sqrt{3}}(\vec{S}_1 \times \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \times \vec{S}_3 + \vec{S}_3 \times \vec{S}_1) \\ &= (\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z)\end{aligned}\tag{5.1}$$

$$\delta A = \frac{1}{N_{sample} - 1} \sqrt{\langle A_t^2 \rangle - \langle A_t \rangle^2}\tag{5.2}$$

ここで $2/3\sqrt{3}$ は規格化のための定数、 A は物理量、 N_{sample} はサンプル数を表す。

また、その他の条件・手法は第3で述べたとおりである。

5.1 非平衡緩和法による測定結果

表5.2の計算条件による、非平衡緩和解析の結果は図5.1と5.2のとおりである。横軸をステップ数、縦軸をオーダーパラメータとして、各温度ごとのデータを両対数プロットしている。

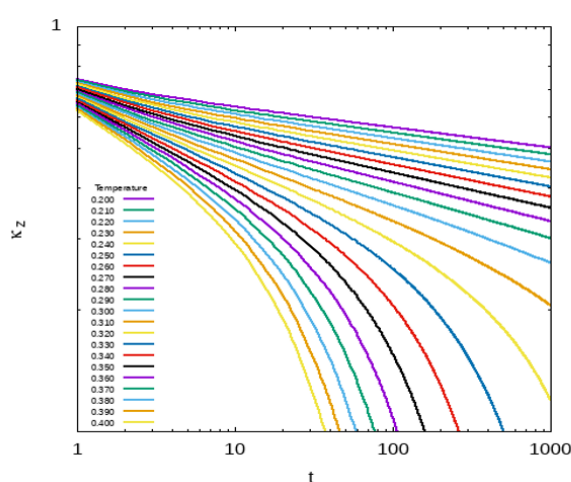


図5.1 κ_z の緩和データ

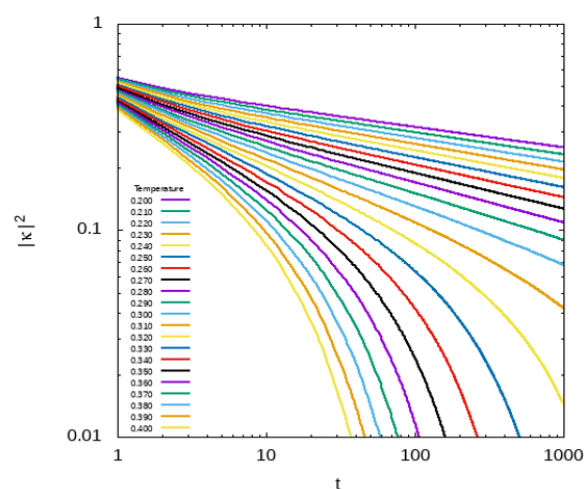


図5.2 $|\kappa|^2$ の緩和データ

表5.1 非平衡緩和解析のスケール

Size	Sample	Step	Temperature
1001×1002	120	～1000	0.200～0.400

節4.1におけるオーダーパラメータの緩和の式(式(4.1)や式(4.5))より、結果の図における各温度の線の傾きから大まかな転移温度を視覚的に判断することができる。すなわち、曲線にならず直線状に伸びている温度と、上に凸に曲がっている線の温度の境が今回の場合における転移温度近傍であるということである。すなわち、転移温度近傍より低温側の直線が下に凸にならずすべて直線状に伸びていることから、相転移の種類は2次転移ではなくK T転移であるという予測が得られる。また、0.300度の線およびそれより高温の線は明らかに曲がっていることが確認できることから、転移温度 T_c はそれより少し低温の0.250～0.300度あたりであるという予測も得られる。

5.2 動的スケーリング解析

解析を行う前にまず、サイズ依存性の確認を慎重に行う。

サイズ依存性の確認

最大ステップ数が増えるとスケールの小さいサイズにおいて不適切な値が算出されてしまい、そのような結果を使用してしまうとスケーリング結果の精度が下がってしまう。そこで、スケーリング解析の前にサイズ依存性が出ていないかの確認をする。結果は図5.2、図5.4のようになり、例えば図5.4では1000サイズのとくに大幅にサイズ依存性が出ていることが見られる。この結果は先の図5.1、5.2においてサイズ依存性が出ていないことも示す。動的スケーリング解析では経験的に100000stepほど必要となるので、この結果を踏まえ確実にサイズ依存性が出ていないサイズ4000のデータを計算し、解析に使う。

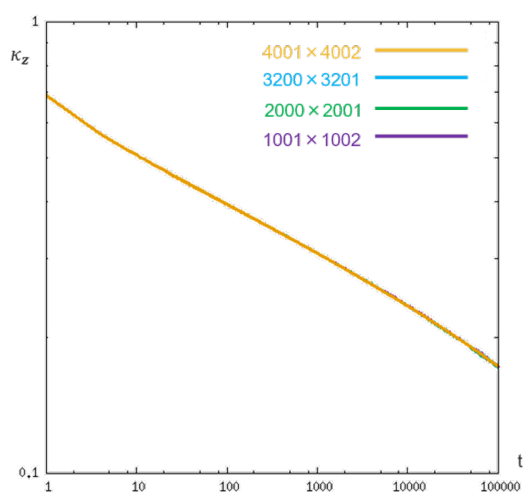


図5.3 各サイズごとの結果： κ_z

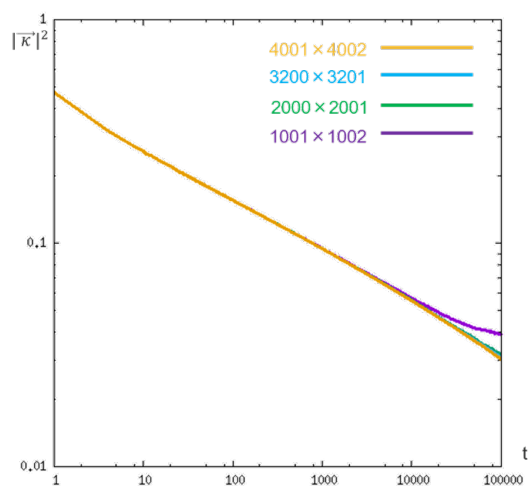


図5.4 各サイズごとの結果： $|\bar{\kappa}|^2$

表5.2 サイズ依存性の確認

Size	Sample	Step	Temperature
1001×1002～4001×4002	864	～100000	0.2875

τ の関数形の仮定について

動的スケーリング解析を行う上での緩和時間 τ において、次の関数形を仮定した。

$$\tau(T) \sim \begin{cases} a \exp(b/\sqrt{T - T_c}) & \text{K T 転移 (一般的)} \\ a \exp(b/(T - T_c)^{0.75}) & \text{K T 転移 (比較のため)} \\ a \exp(b/(T - T_c)) & \text{K T 転移 (特殊な場合)} \\ a|T - T_c|^{-b} & \text{2 次転移} \end{cases} \quad (5.3)$$

この式(5.3)における一番上の関数形が一般的なK T転移における τ の関数形であり、ルートなしの関数形は特殊な場合、またその間のべき0.75乗は比較のために計算している。また前述のマーミンワグナーの定理により（反）強磁性転移は起こらないとされているが、比較のため2次転移仮定のスケーリング解析も行った。

そして、結果の判別のため関数無仮定の動的スケーリング解析も行った。第4章でも述べたが、これは温度ごとにノンパラメトリックに解析した結果であるため最も信憑性が高いと考えられている。

緩和データ

転移温度近傍とそれより高温のデータでスケーリング解析をする。先の転移温度の予測より、高温側のデータを0.0025度刻みに11点の緩和データを用いる。また、サンプル数も864個に増やし計算スケールの拡大を図った。なお、この数は東大物性研で使用した計算機のCPU数に準じている。動的スケーリング解析では非平衡緩和法で測定した結果データから解析にて有用性があると考えられる部分を図5.5のようにまとめ抜き出す。このとき、緩和までの様子を明確に示すデータを探りつつ、また緩和後の不必要となるデータを除去することでスケーリング解析の精度が下がらないよう留意した。

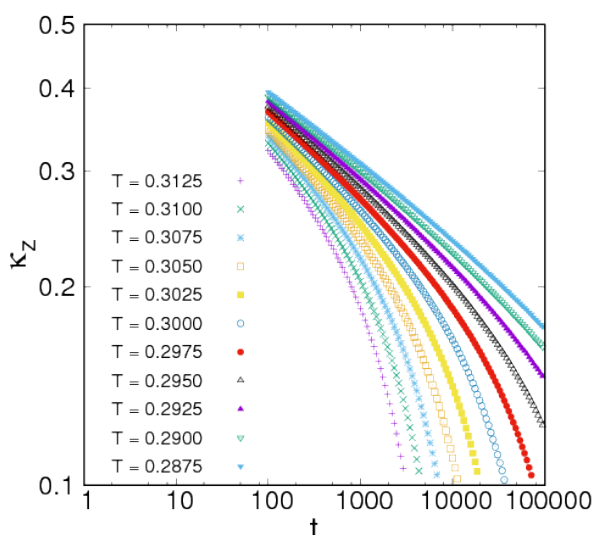
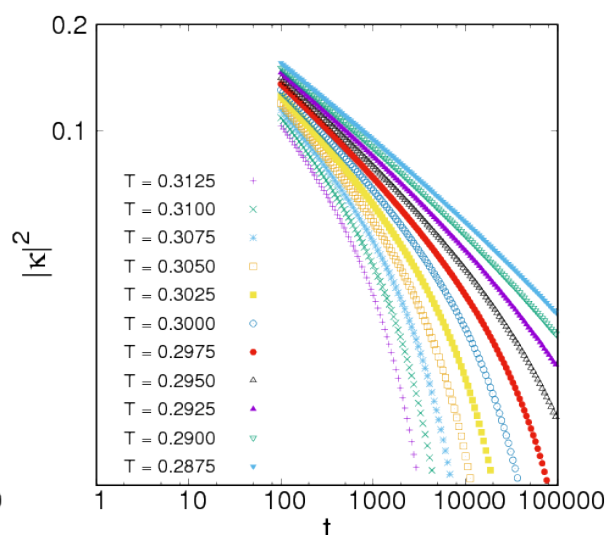
図5.5 緩和データ： κ_z 図5.6 緩和データ： $|\kappa|^2$

表5.3 非平衡緩和解析のスケール

Size	Sample	Step	Temperature
4001×4002	864	～ 100000	0.2875～0.3125

緩和データの結果の図5.5より図5.7～5.11が、図5.6より図5.13～5.17がスケーリングプロット結果として得られた。

スケーリングプロット： κ_z

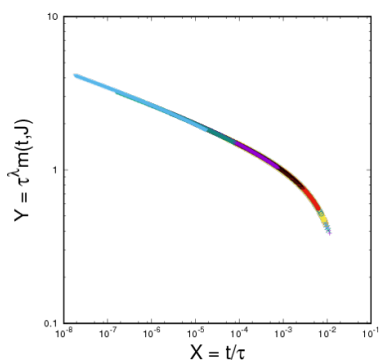


図5.7 $\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$ 仮定

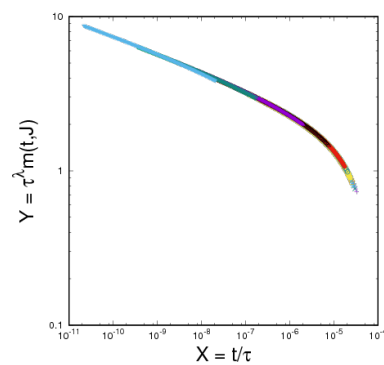


図5.8 $\tau(T) \sim a|T - T_c|^{-b}$ 仮定

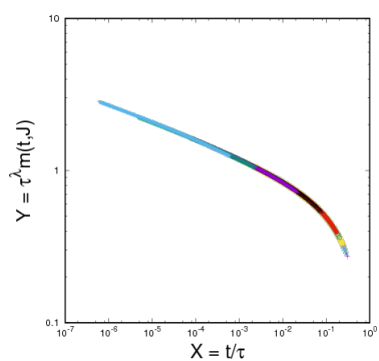


図5.9 $\tau(T) \sim a \exp(b/(T - T_c)^{0.75})$ 仮定

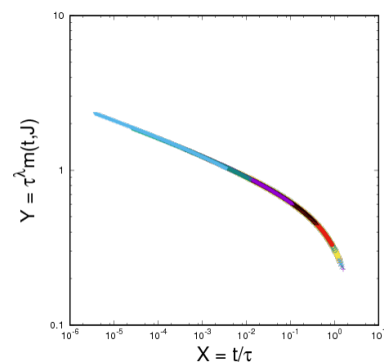


図5.10 $\tau(T) \sim a \exp(b/(T - T_c))$ 仮定

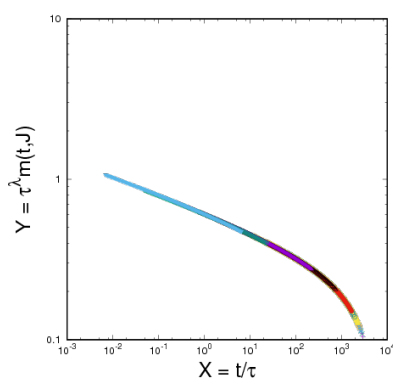


図5.11 関数無仮定

解析をした結果すべて収束し、様々な時刻や温度のデータは変換され1つのスケーリング関数上に乗った。

比較結果： κ_z

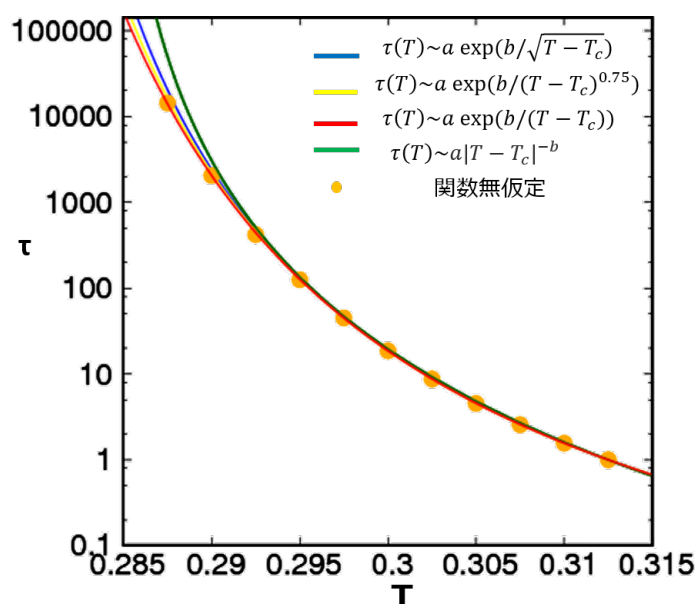


図5.12 比較結果

表5.4 パラメータ比較結果： κ_z

関数形	相転移	T_c	λ	z	尤度	残差
$\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$	KT	0.2760	0.105	2.41E+00	4921	8.26E-03
$\tau(T) \sim a \exp(b/(T - T_c)^{0.75})$	KT	0.2718	0.104	8.38E-01	4997	3.59E-04
$\tau(T) \sim a \exp(b/(T - T_c))$	KT	0.2675	0.104	3.41E-01	5018	3.89E-03
$\tau(T) \sim a T - T_c ^{-b}$	2nd	0.2838	0.106	5.21E+00	4377	4.78E+00
無仮定	-	-	-	-	5091	-

考察

スケーリングプロットより算出される結果としての緩和時間を比較したのが図5.12である。明確に2次転移を否定し、関数無仮定のプロット点にKT転移を仮定した結果が載った。また、尤度は関数無仮定を除けばKT転移を仮定する3本が高い値を示し、残差も2次転移以外はかなり小さい値となった。

スケーリングプロット： $|\vec{k}|^2$

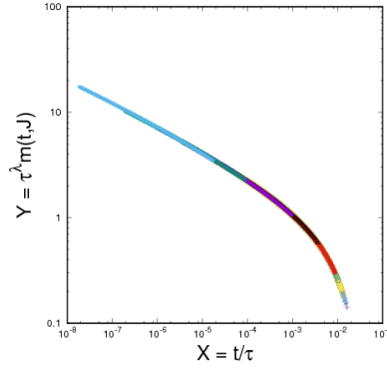


図5.13 $\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$ 仮定

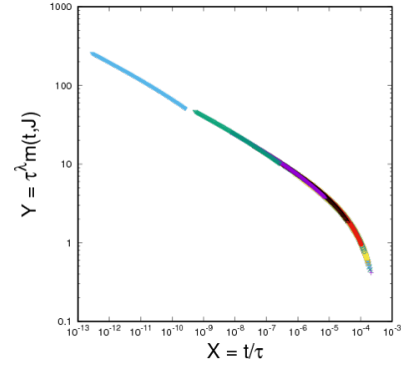


図5.14 $\tau(T) \sim a|T - T_c|^{-b}$ 仮定

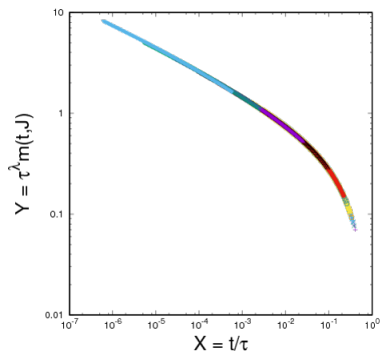


図5.15 $\tau(T) \sim a \exp(b/(T - T_c)^{0.75})$

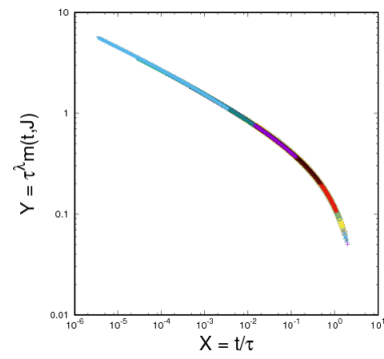


図5.16 $\tau(T) \sim a \exp(b/(T - T_c))$ 仮定

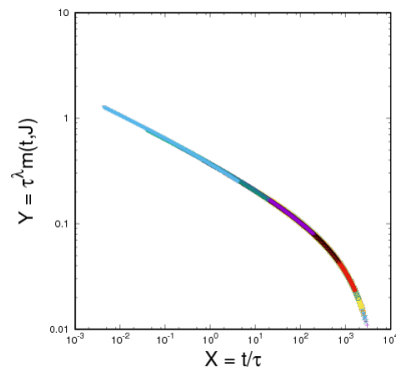


図5.17 関数無仮定

また、これらのオーダーパラメータにおいてもすべて問題なく収束した。

比較結果： $|\kappa|^2$

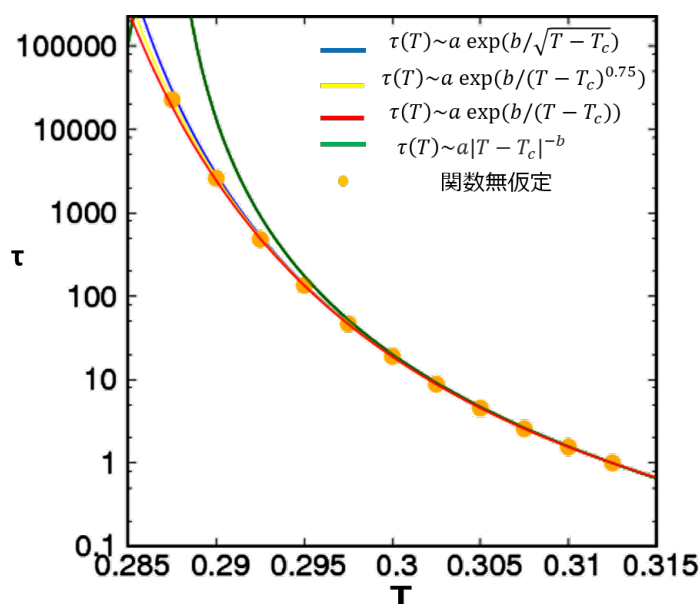


図5.18 比較結果

表5.5 パラメータ比較結果： $|\kappa|^2$

関数形	相転移	T_c	λ	z	尤度	残差
$\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$	KT	0.2771	0.211	2.29E+00	4342	8.26E-03
$\tau(T) \sim a \exp(b/(T - T_c)^{0.75})$	KT	0.2729	0.210	7.94E-01	4398	3.59E-04
$\tau(T) \sim a \exp(b/(T - T_c))$	KT	0.2688	0.209	3.21E-01	4386	3.89E-03
$\tau(T) \sim a T - T_c ^{-b}$	2nd	0.2869	0.222	4.52E+00	3605	4.78E+00
無仮定	-	-	-	-	4472	-

考察

Z成分の時と同様、比較結果の図(5.18)、尤度、残差のすべてが明確に2次転移を否定し、KT転移を示すものであった。KT転移を仮定した結果はいずれも僅差であるため、Z成分と2乗の両方の結果を踏まえても、関数形の決定までは現段階では議論できない。しかし、この章の結果で強調すべき点は、本系がKT転移として解析して相転移がきちんと解析されて、かつ、今までの転移温度の結果を踏襲していたことにより、本系に示唆さ

れている相転移の存在を強く示したということである。

また臨界指数 λ のパラメータ結果について、いずれのKT転移仮定においても κ_z では0.1近傍、 $|\vec{\kappa}|^2$ では0.2近傍で評価されている。すなわち、 κ_z の λ が $|\vec{\kappa}|^2$ の結果に比べおよそ2倍となっているが、これに関しては

$$\lambda = \begin{cases} \eta/2z & (\kappa_z \text{ のとき}) \\ \eta/z & (|\vec{\kappa}|^2 \text{ のとき}) \end{cases} \quad (5.4)$$

という式が成り立つことが知られており、矛盾のない結果となっている。転移温度や z の値においてもほぼ同じであり、2種類のオーダーパラメータの結果はコンシステントであるといえる。

第6章

その他のシミュレーションと解析

本系がKT転移であるという議論を深めるため、様々なシミュレーションを行った。

6.1 サブラティス磁化

前章では、オーダーパラメータはベクトルカイラリティであったが、サブラティス磁化（式6.1）も計算した。

$$m = \sum_i \vec{S}_i^0 \cdot \vec{S}_i \quad (6.1)$$

ここで \vec{S}_i^0 は*i*番目のスピンの初期配置である。それ以外の条件は前章と同じである。サブラティス磁化においてKT転移の振る舞いが出たという研究結果はこれまでに無いが、ベクトルカイラリティとは別のKT転移を示すオーダーパラメータとなること、すなわちベクトルカイラリティの比較対象となることを期待し、この計算および動的スケーリング解析を行った。

表6.1 計算条件

Size	Sample	Step	Temperature
2000×2001	864	～100000	0.285～0.330

解析結果

図6.1の緩和データをもとに動的スケーリング解析をした結果が表6.2～6.4である。また尤度や残差の結果を表6.2にまとめた。

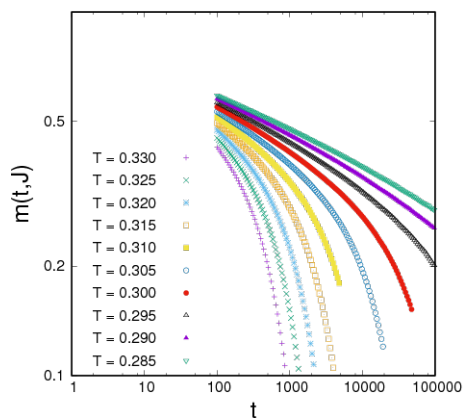


図6.1 緩和データ

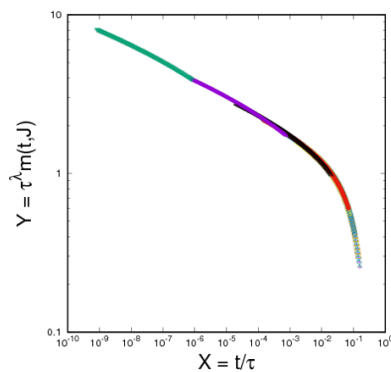
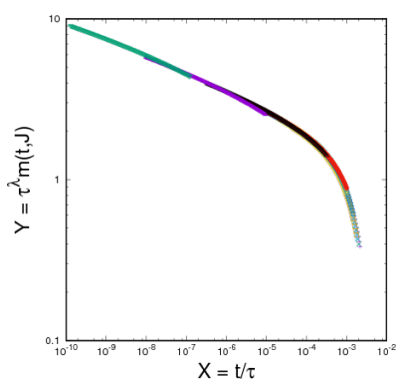
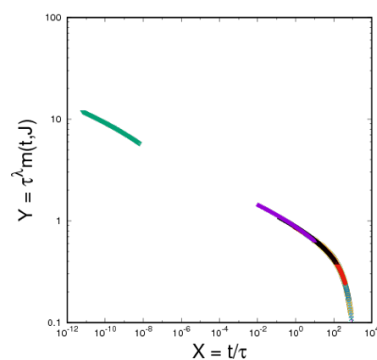
図6.2 $\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$ 仮定図6.3 $\tau(T) \sim a|T - T_c|^{-b}$ 仮定

図6.4 関数無仮定

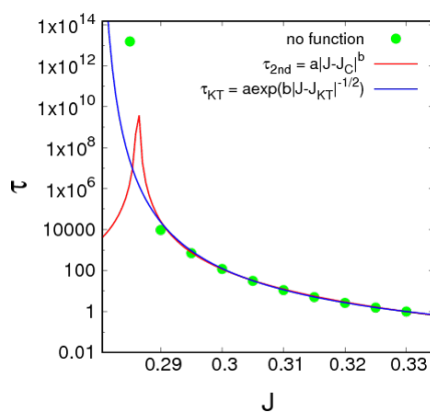


図6.5 比較結果

表6.2 パラメータ比較結果： κ_z

関数形	相転移	尤度	残差
$\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$	KT	3667	1.82E+01
$\tau(T) \sim a T - T_c ^{-b}$	2nd	2732	2.53E+01
無仮定	-	4050	-

考察

比較結果(図6.5)を見るも、オーダーパラメータがベクトルカイラリティの時と比べ、明確にKT転移を示してるとは言い切れない。よってこのサブラティス磁化は相転移を解析する上でのオーダーパラメータとして適当ではないと考えられる。ここで、 $\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$ を仮定した結果のパラメータは、 $T_c = 0.2792$ 、 $\lambda = 0.103$ であった。なお平衡MC法においても、本結果のように、このオーダーパラメータの結果とベクトルカイラリティの結果とで似て非なる結果が報告されており、議論としては未解決のままである[23]。

6.2 フラストレート正方格子

これまですべて反強磁性三角格子について取り扱ってきたが、フラストレート正方格子についても計算を行った。前述のとおりXY模型においては、反強磁性三角格子とフラストレート正方格子とともに同じ普遍性であることが示されている。よって、ハイゼンベルグ模型においても同じ普遍性あるいは近しい結果となることを期待した。なお、フラストレート正方格子ハイゼンベルグ模型の振る舞いにおける先行研究の結果は存在しない。初期条件は、フラストレート正方格子XY模型における初期条件(図2.12)を採用する。

サイズ依存性の確認

反強磁性三角格子のときと同様、最初に大まかな範囲で温度計算をし、転移温度を見積もったところ、 T_c は0.070度近傍とかなり低温になった。動的スケーリング解析に向け、この温度でサイズ依存性を調べた。オーダーパラメータはベクトルカイラリティである。

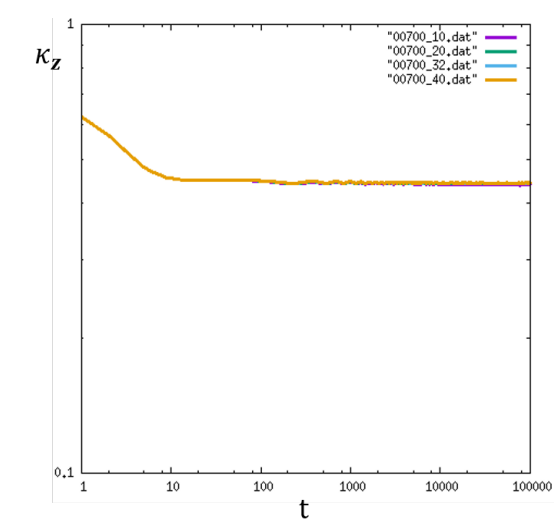


図6.6 Z成分

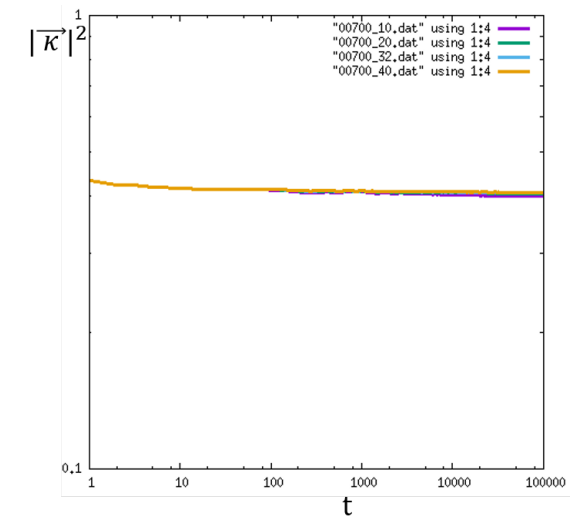


図6.7 2乗

表6.3 計算条件

Size	Sample	Step	Temperature
2001×2002	864	～100000	0.0870～0.0975

動的スケーリング解析

この結果をもとにサイズ2000以上とし、表8.12の条件で計算した結果の緩和データが図6.8である。このデータを用いて動的スケーリング解析を行い、図6.9の結果を得た。

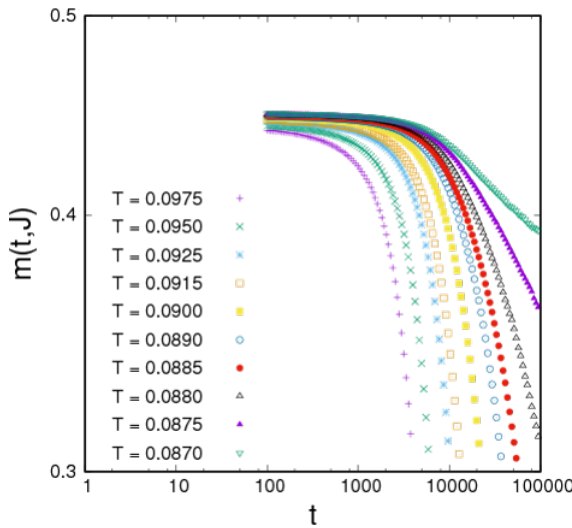


図6.8 緩和データZ成分

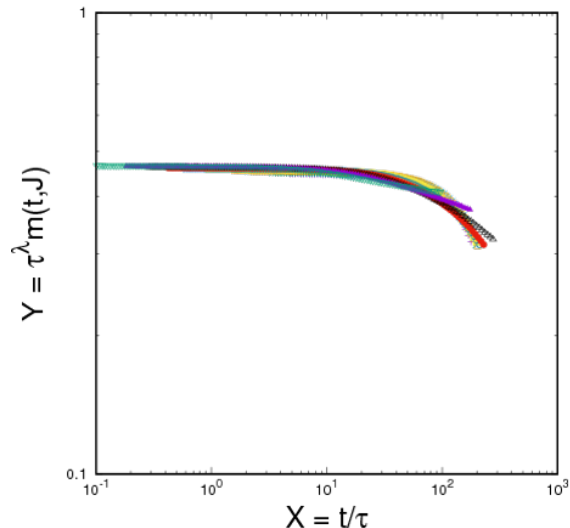


図6.9 解析結果

考察

結果は図6.9のようになり、うまく収束しなかった。この時、動的スケーリング解析は一般的なKT転移の緩和時間の式を仮定した。原因としていくつかの理由が考えられ、まず、計算やプログラミングに根本的な問題が残っているといったことが挙げられる。しかし、それが正しいとして、解析結果が反強磁性三角格子の時のようにうまく収束しないのは、緩和データ（図6.8）におけるプラトー（平らな部分）の存在があるためと考えられる。また他の原因としては初期状態の取り方が挙げられる。本計算ではフラストレート正方格子のXY模型での初期条件を採用したが、ハイゼンベルグ模型においては別の可能性もあったということが考えられる。しかし、この説における具体的な代案は出ておらず、現時点ではこの初期条件が適切と考える他にない。

あるいは、XY模型と違ってハイゼンベルグ模型では、フラストレート正方格子と反強磁性三角格子とで別の普遍性であるという可能性も考えられる

6.3 境界部分の緩和

6.3.1 Ising模型

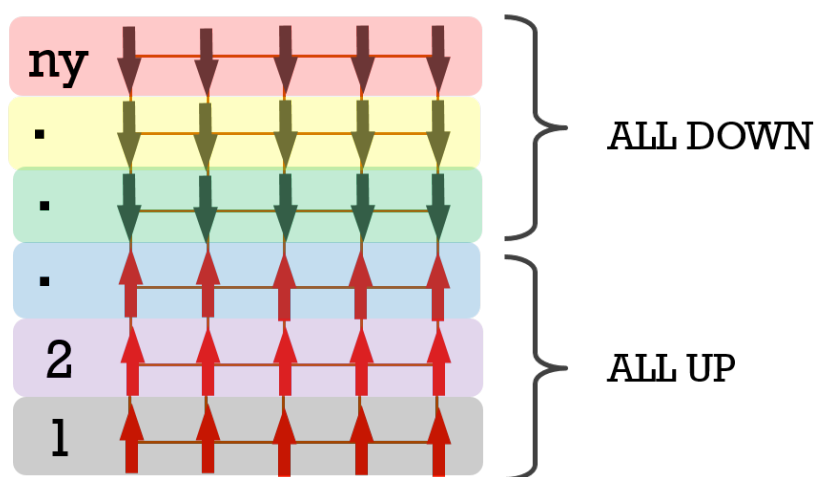


図6.10 Ising

前章において、ベクトルカイラリティとサブラティス磁化の結果の識別が課題となった。そこで、別のアプローチとして境界部分の緩和を調べることを試みた。その足掛け及び比較対象として、まずIsing模型のシミュレーションをする。図6.10の正方格子を行ご

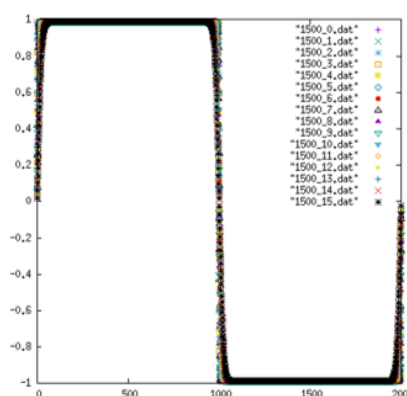
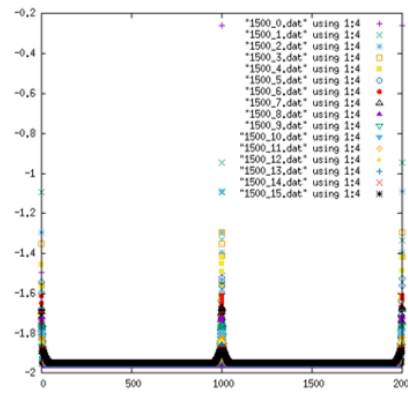
とに計算し、結果は横軸を行、縦軸をパラメータ結果（磁化 m , エネルギー e ）として、各ステップごとに表示する。行番号で言うと、横軸1～1000がALL UP($m=1, e=-2$)、1001～2001がALL DOWN($m=-1, e=-2$)を初期条件とする。いずれの結果もステップ数 2^n ごとに計算し、 $2^0(1)$ から $2^{15}(32768)$ まで16箇所計算している。

表6.4 非平衡緩和解析のスケール

Size	Sample	Step	Temperature
2000×2001	864	$2^0 \sim 2^{15}(32768)$	1.50～3.00

計算結果

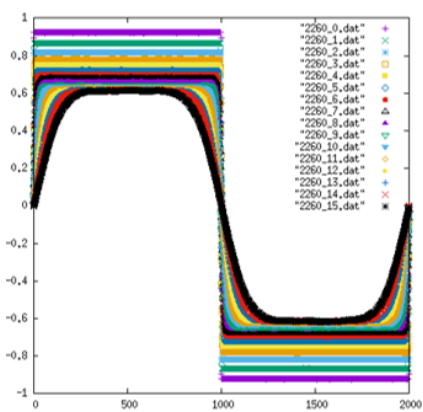
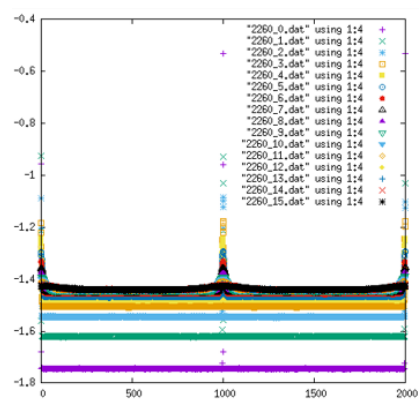
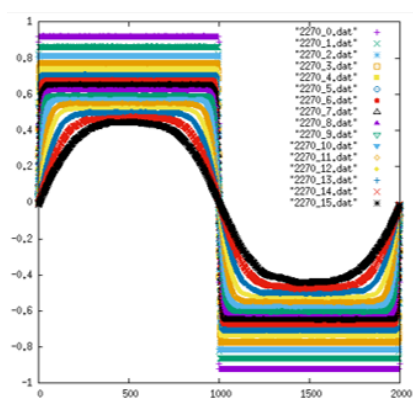
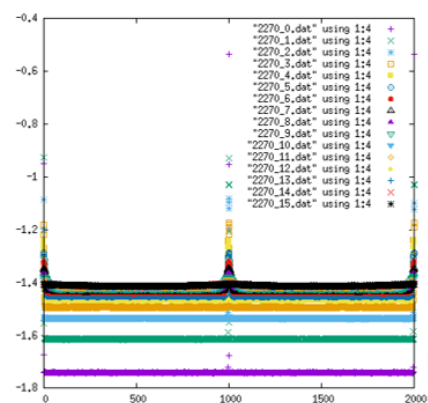
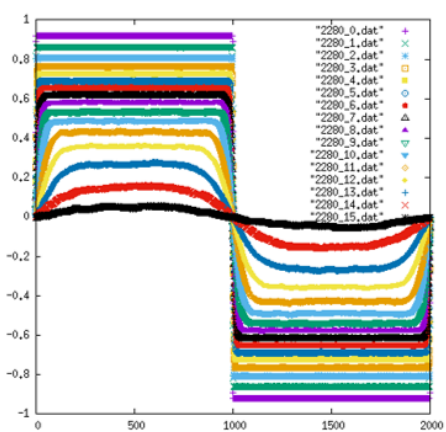
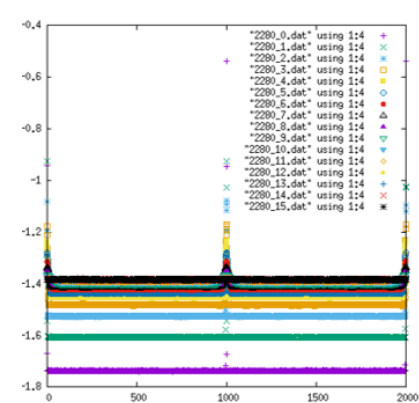
転移温度が $T_c \sim 0.2767$ であるのでそれを挟むように温度を5か所選び、各温度ごとに結果を算出した。結果の図において、紫線が 2^n における $n = 0$ の結果で、そこから黒($n = 15$)まで順にすべて結果を載せている。

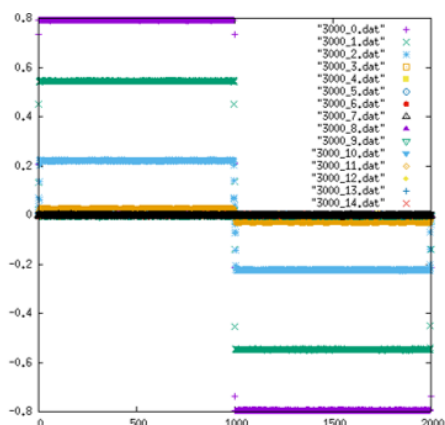
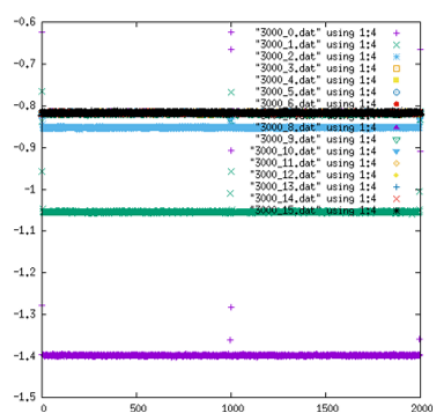
図6.11 磁化 $m(T=1.50)$ 図6.12 エネルギー $e(T=1.50)$

まず温度 $T=1.50$ は転移温度よりかなり低温である。その結果は図6.3.1と図6.12ともに、いずれも1本にすべて重なっている。すなわち初期条件のままほぼ全く変化していない。Ising模型は低温において（反）強磁性であるので、期待通りの結果、振る舞いが観測できていることがわかる。

図6.16から図6.18までは、転移温度上および近傍の結果となっている。エネルギーにおいては徐々に上がっている振る舞いしかわからないが、磁化においてはその境界部分で半円を描きながら収束する過程が観測できた。

また逆に高温側において、Ising模型は常磁性相である。ここで明らかに高温側である $T = 3.0$ の磁化の結果では、たった $2^4(16)$ step程度で0に収束していることがわかる。た

図6.13 磁化 $m(T=2.26)$ 図6.14 エネルギー $e(T=2.26)$ 図6.15 磁化 $m(T=2.27)$ 図6.16 エネルギー $e(T=2.27)$ 図6.17 磁化 $m(T=2.28)$ 図6.18 エネルギー $e(T=2.28)$

図6.19 磁化 $m(T=3.00)$ 図6.20 エネルギー $e(T=3.00)$

だし収束がはやすぎるため相転移近傍のように変化していく曲線は観測できなかった (step間隔を狭めれば観測できるかもしれない)。

6.3.2 XY模型

もう1つ比較対象として反強磁性三角格子XY模型の境界を調べる。2重縮退を利用し、次の図6.21のように初期状態を分割する。オーダーパラメータとして、KT転移を示すスピン配向秩序パラメータ (式(2.4)) と、カイラル転移を示すカイラル秩序パラメータ (式(2.5)) の2種類を計算した。温度は転移温度を挟むようにした。なお、本系の転移温度は先行研究により表6.9のような結果が知られている。

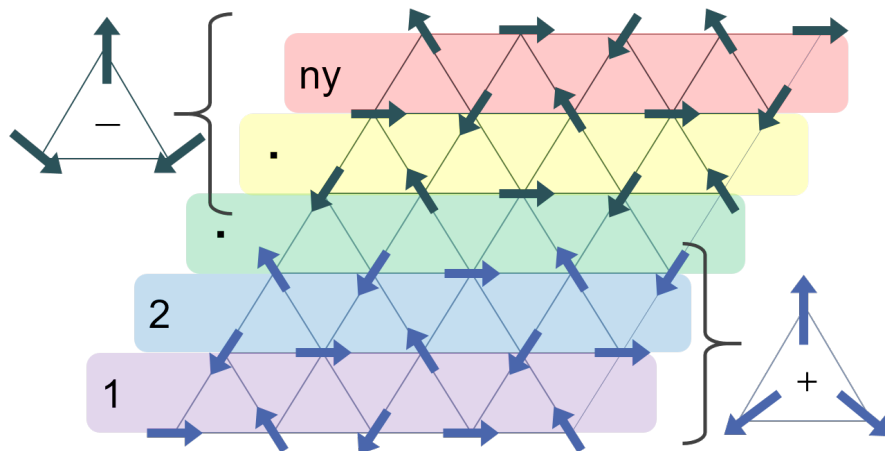


図6.21 反強磁性三角格子XY模型

今回計算したのは温度 $T=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ であるので、いずれの相転移 (オーダーパ

表6.5 非平衡緩和解析のスケール

Size	Sample	Step	Temperature
2003×2004	864	$2^0 \sim 2^{15}$ (32768)	0.20~1.00

表6.6 転移温度：反強磁性三角格子X Y 模型

Method	year	T_c	T_{KT}
NER [1]	2003	0.512(1)	0.508(1)
MC [24]	2012	0.51251(3)	-
NER [20]	2017	0.5121(2)	0.50849(7)

ラメータ)においても転移温度は $T=0.4$ と 0.6 の間となる。そして、オーダーパラメータによって違う相転移(スピン配向秩序パラメータではK T 転移、カイラル秩序パラメータはカイラル転移)を示すので、この結果において明確な違いが現れることを期待する。

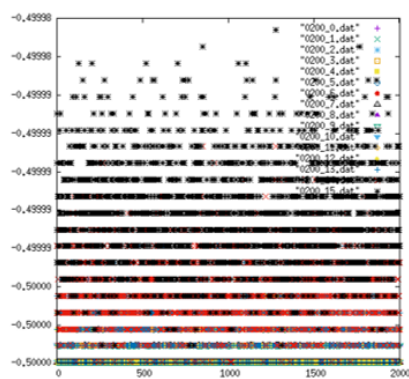
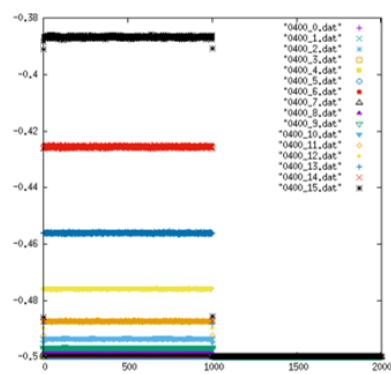
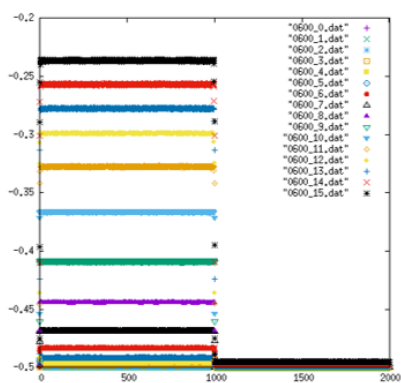
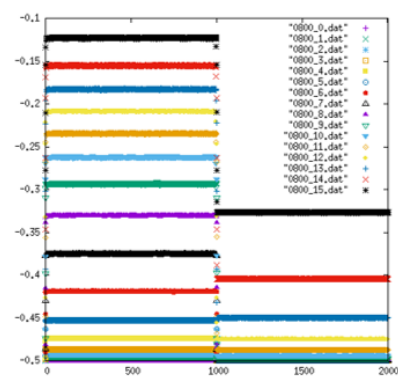
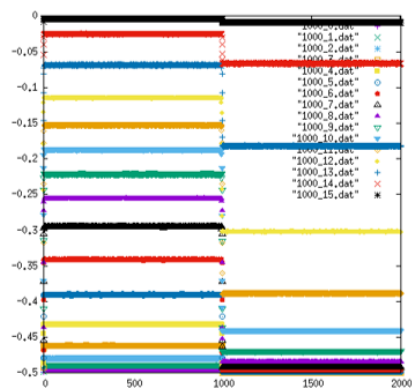
計算結果

スピン配向秩序パラメータの結果は図6.22から図6.26までである。低温($T=0.20$)では変動がなく、高温、特に $T=1.00$ の結果は全面的に1に向かって緩和していく様子が見られる。しかし時間差が生じていることが、どの温度においても見てとれる。

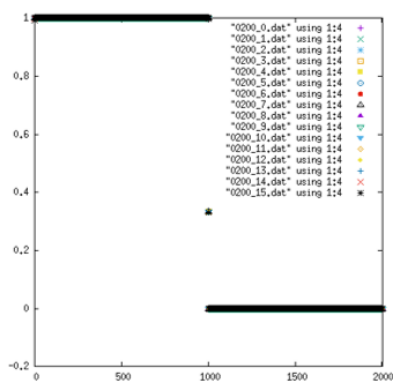
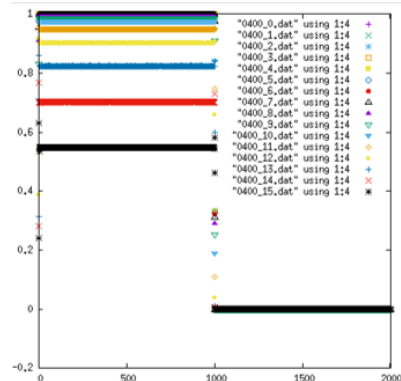
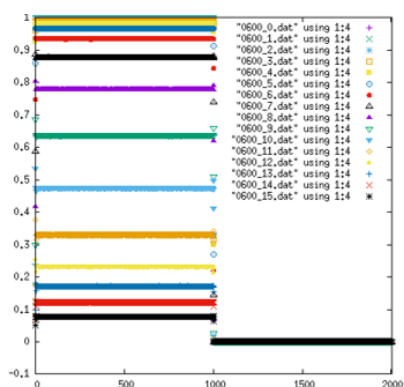
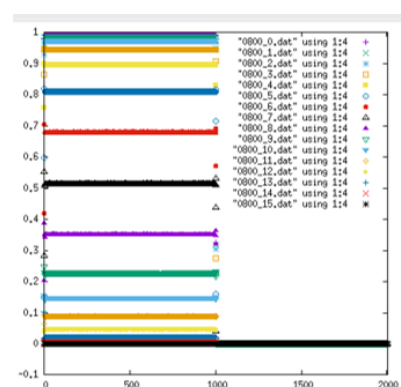
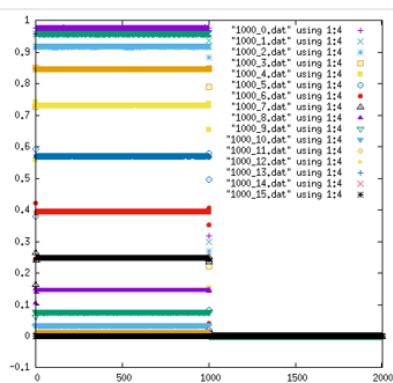
またカイラル秩序パラメータの結果は図6.27から図6.31までである。こちらの結果は低温($T=0.20$)において変化なしで、高温になるに連れ左部分(横軸1~1000)が0に向かって緩和する様子が見られる。その間隔は最初は緩やかであるがそのあと速くなり、最後にまた穏やかに収束している過程が観測できる。

しかしいずれもIsingのような境界部分の緩和は観測できなかった。しかし、温度の取り方が $T=0.4, 0.6$ と転移温度の $T=0.5$ とやや離れていただけという可能性もある。

スピン配向秩序パラメータ

図6.22 $T=0.20$ 図6.23 $T=0.40$ 図6.24 $T=0.60$ 図6.25 $T=0.80$ 図6.26 $T=1.00$

カイラル秩序パラメータ

図6.27 $T=0.20$ 図6.28 $T=0.40$ 図6.29 $T=0.60$ 図6.30 $T=0.80$ 図6.31 $T=1.00$

6.3.3 ハイゼンベルグ模型(パターン1)

2種類の初期条件を考えた。まずパターン1として、先ほどのXY模型における取り方と同じ初期条件でベクトルカイラリティとサブラティス磁化について計算した。先ほどの研究(節6.1)ではサブラティス磁化はオーダーパラメータとして、ベクトルカイラリティのように動的スケーリング解析で期待されるような結果が出なかった。その理由が解明されるような明確な違いをこの研究に期待する。

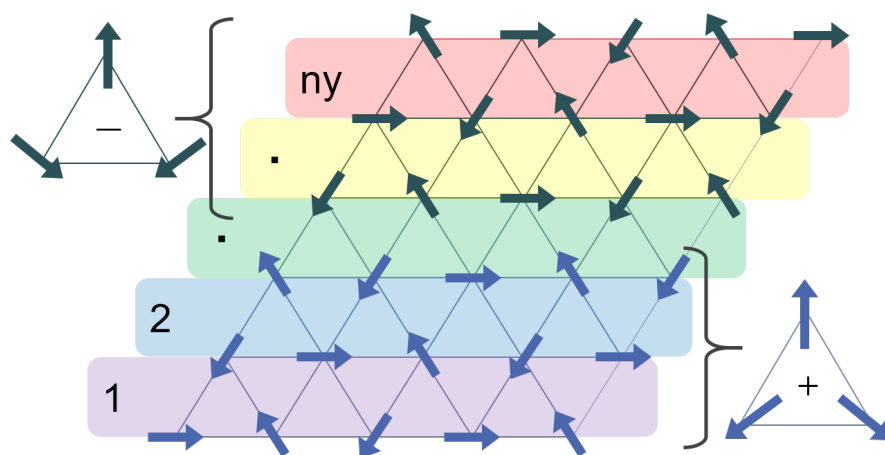


図6.32 反強磁性三角格子ハイゼンベルグ模型

表6.7 非平衡緩和解析のスケール

Size	Sample	Step	Temperature
2003×2004	864	$2^0 \sim 2^{15}$ (32768)	0.27~0.33

ベクトルカイラリティ

初期状態においてベクトルカイラリティの左半分(横軸1~1001)はZ成分の正、右半分(横軸1002~2004)はZ成分の負に向いている。そのため、状態でいえばALL UP、ALL DOWNで分割されているIsing模型における磁化の初期状態と類似している。その結果は図6.33から図6.40であり、Z成分と2乗と計算している。

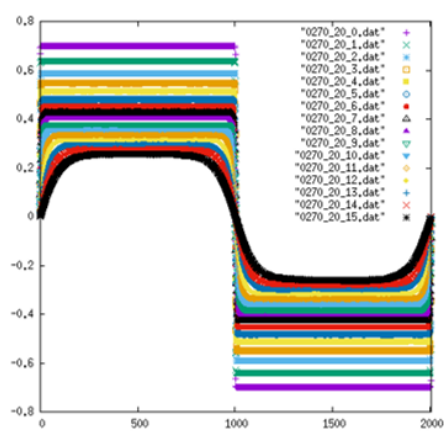


図6.33 Z成分(T=0.27)

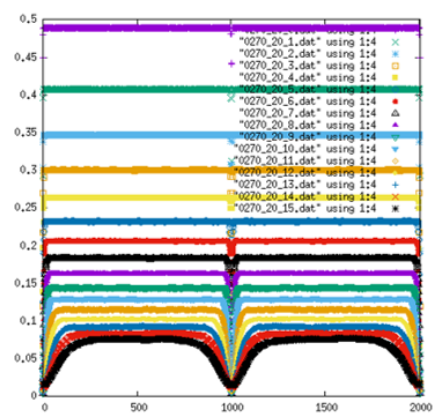


図6.34 2乗(T=0.27)

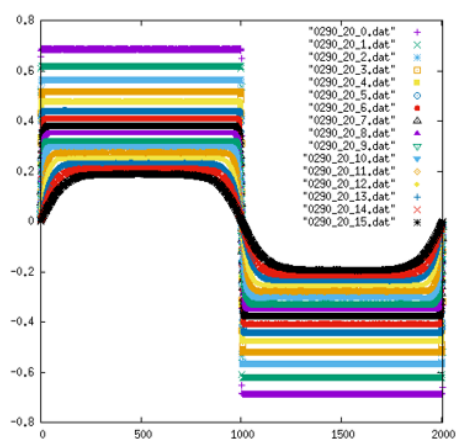


図6.35 Z成分(T=0.29)

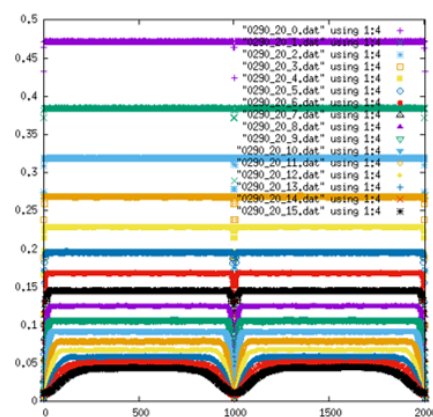


図6.36 2乗(T=0.29)

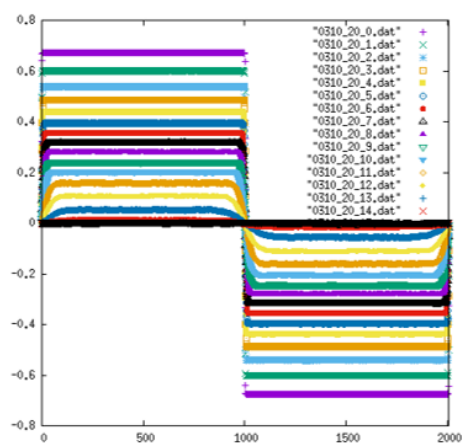


図6.37 Z成分(T=0.31)

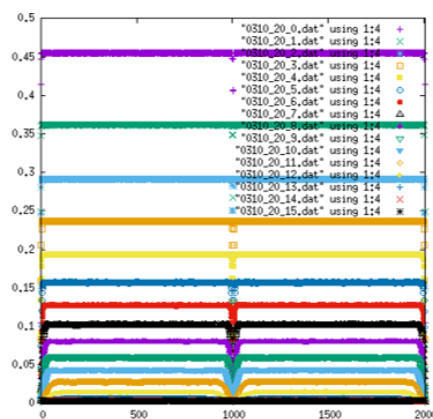


図6.38 2乗(T=0.31)

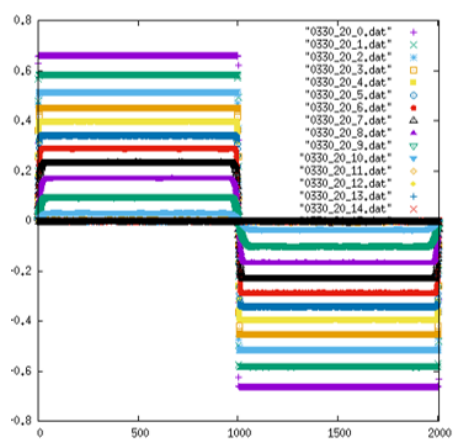


図6.39 Z成分(T=0.33)

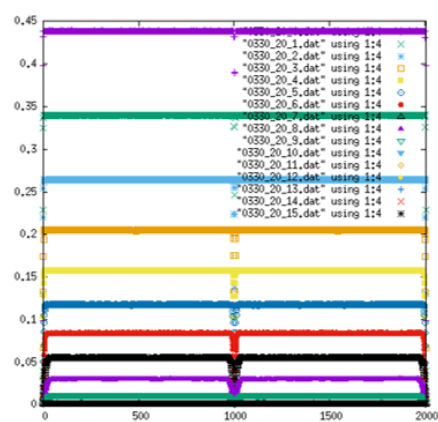


図6.40 2乗(T=0.33)

サブラティス磁化

結果は図6.41から図6.48であり、その1乗と2乗を計算している。

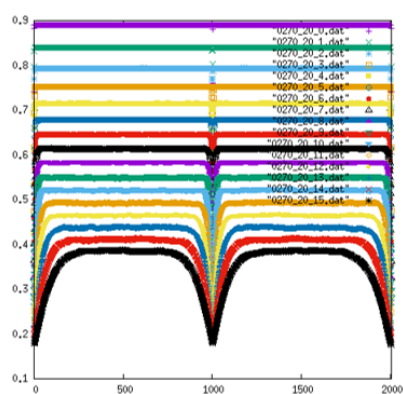


図6.41 1乗(T=0.27)

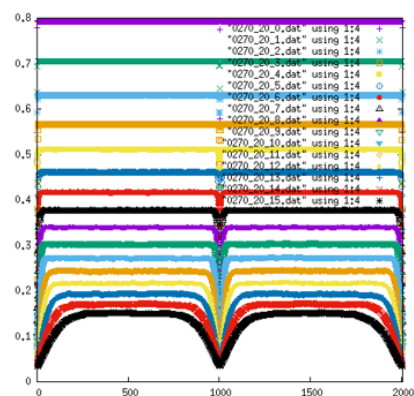
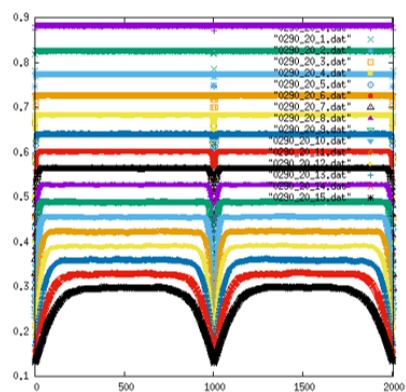
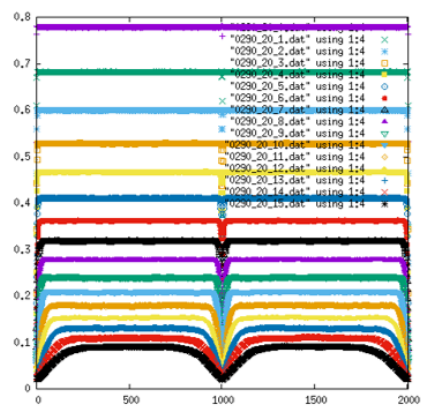
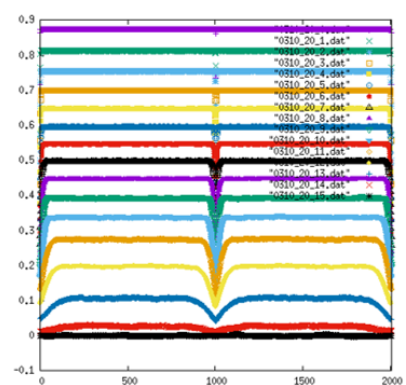
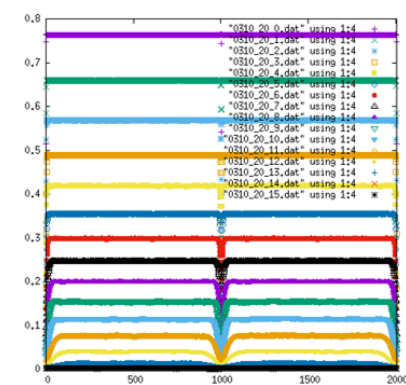
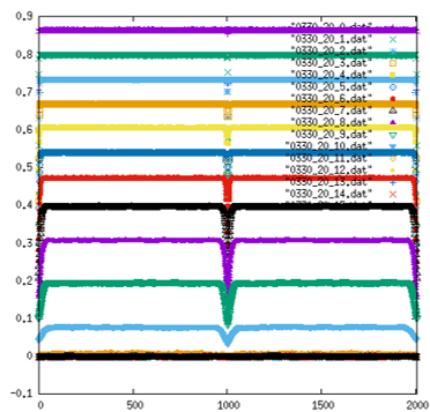
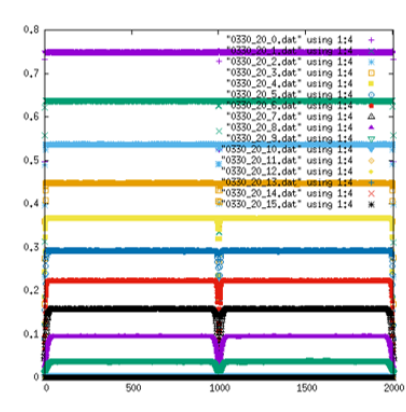


図6.42 2乗(T=0.27)

図6.43 1乗($T=0.29$)図6.44 2乗($T=0.29$)図6.45 1乗($T=0.31$)図6.46 2乗($T=0.31$)図6.47 1乗($T=0.33$)図6.48 2乗($T=0.33$)

動的スケーリング解析

また、参考までにこの初期条件から緩和データを計算し、動的スケーリング解析を行った。このときそのまま全体の初期条件を計算してしまうとオーダーパラメータは0からはじまってしまうため緩和データとして不適切となる。そこで基底状態がマイナスである部分に-1をかけ、オーダーパラメータの初期条件が正になるようにし、計算を行った。オーダーパラメータはベクトルカイラリティのZ成分および2乗である。いずれも計算条件は表のとおりである。

表6.8 非平衡緩和解析のスケール

Size	Sample	Step	Temperature
2001×2002	864	～1000	0.285～0.330

図6.49の緩和データ（ベクトルカイラリティZ成分）から図6.50～6.52が、図6.54から図6.55～図6.53がそれぞれ解析結果として得られた。

表6.9 パラメータ結果

秩序変数	T_c	λ
κ_z	0.28212	0.11717
$ \vec{\kappa} ^2$	0.28226	0.23461

2種類のオーダーパラメータにおける結果はコンシステントであるが、転移温度などこれまでの結果とずれが生じた。さらに緩和時間の比較結果はいずれも2次転移よりは残差は小さいが、やや無仮定と離れた結果となった。ただしあくまでステップ数が少ないため、その影響を受けている（少しサイズ依存性で高温側に出ている）と考えるのが自然である。

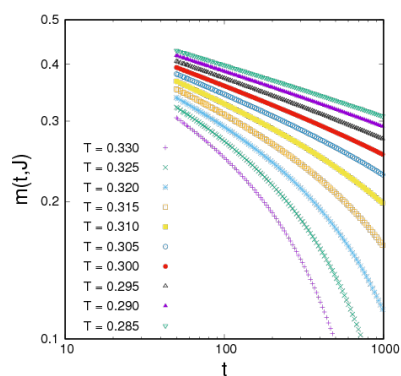


図6.49 緩和データ:ベクトルカイラリティ Z成分

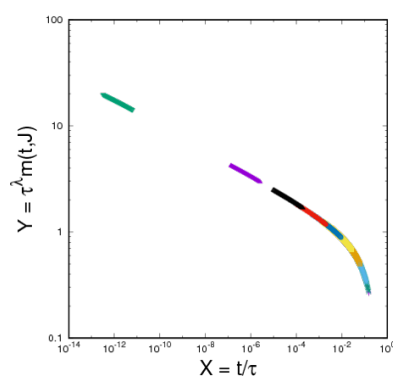
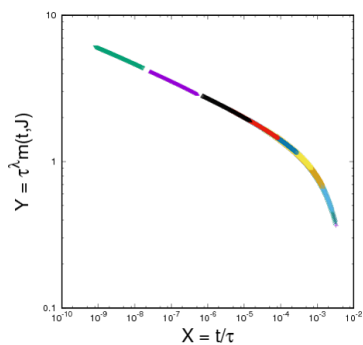
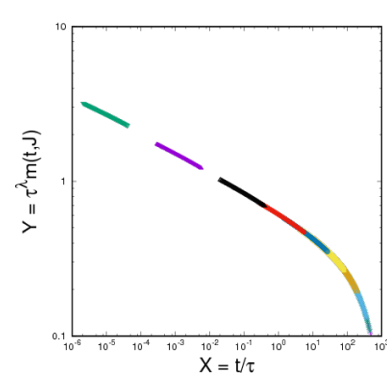
図6.50 $\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$ 仮定 (尤度: 5708)図6.51 $\tau(T) \sim a|T - T_c|^{-b}$ 仮定 (尤度: 4349)

図6.52 関数無仮定 (尤度: 5968)

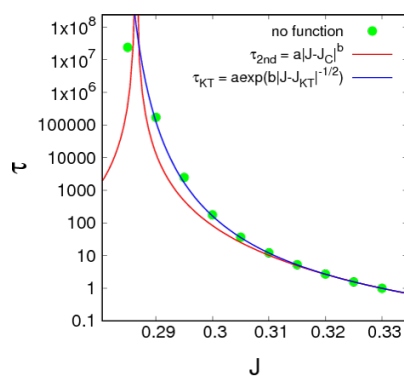


図6.53 比較結果 (Z成分)

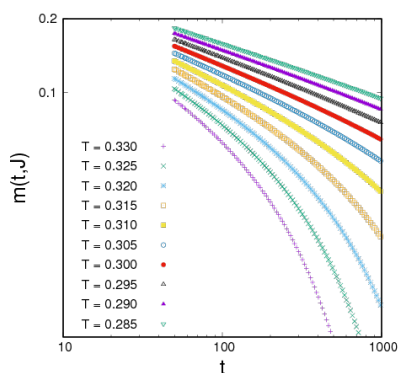


図6.54 緩和データ：ベクトルカイラリティ 2 乗

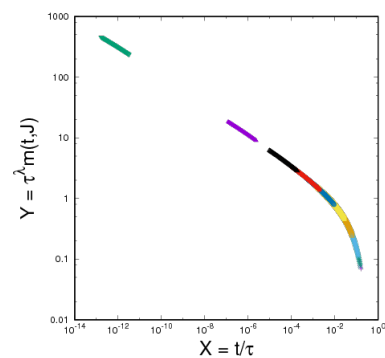
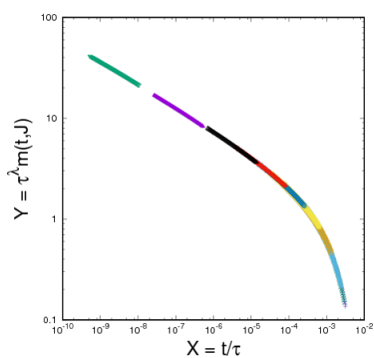
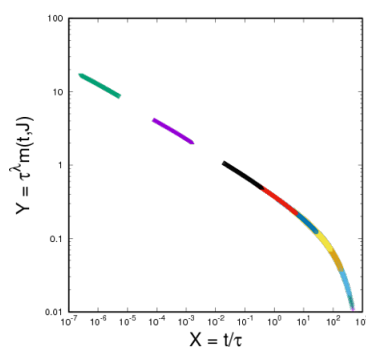
図6.55 $\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$ 仮定
(尤度：5012)図6.56 $\tau(T) \sim a|T - T_c|^{-b}$ 仮定 (尤度：
3657)

図6.57 関数無仮定 (尤度：5281)

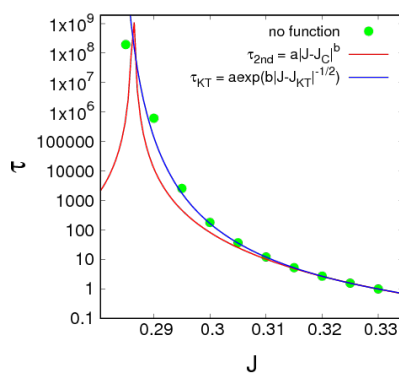


図6.58 比較結果 (2 乗)

6.3.4 ハイゼンベルグ模型(パターン2)

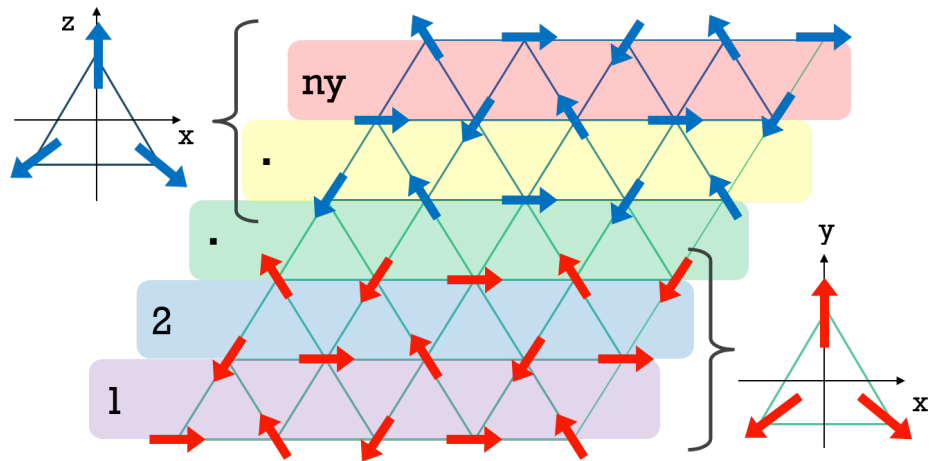


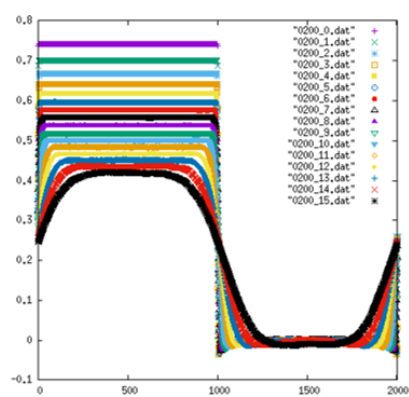
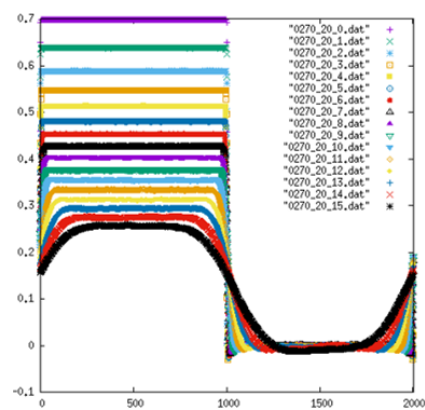
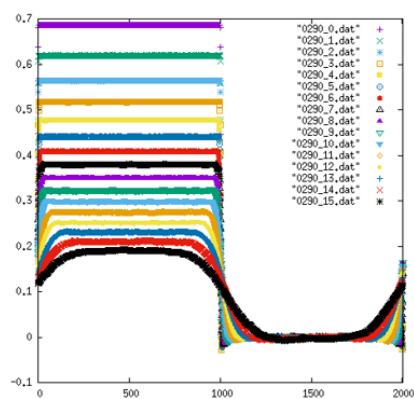
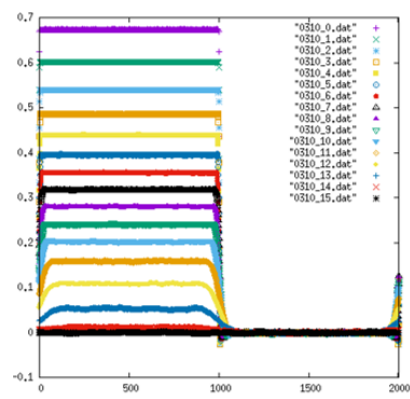
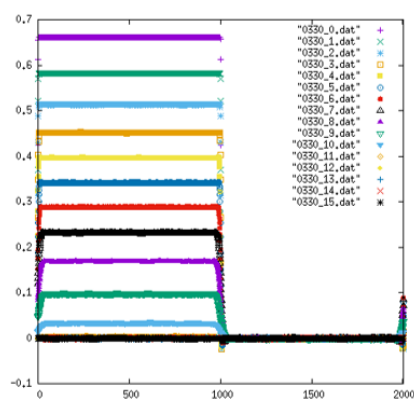
図6.59 反強磁性三角格子ハイゼンベルグ模型

表6.10 非平衡緩和解析のスケール

Size	Sample	Step	Temperature
2003×2004	864	$2^0 \sim 2^{15}(32768)$	0.27~0.33

これまで2重縮退を利用することで、初期条件を半分にして境界の緩和を観測してきた。その比較対象として次に、半分はベクトルカイラリティZ成分の初期値が1に、半分はY成分の初期値が1になるようにし、同様の観測を行った。

ベクトルカイラリティ (Z成分)

図6.60 $T=0.20$ 図6.61 $T=0.27$ 図6.62 $T=0.29$ 図6.63 $T=0.31$ 図6.64 $T=0.33$

結果図の左半分は実質パターン1と初期条件が同じであるため、その振る舞いはほぼ

定性的に一致している。ただし右半分はパターン1では-1からであったが本ケースはY成分に向けているので0から緩和がはじまる。その影響でこれまでに見られなかった振る舞い（底のへこみ）が緩和途中において見られる。

ベクトルカイラリティ（Y成分）

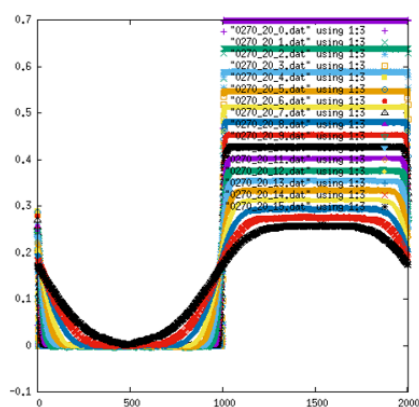


図6.65 T=0.27

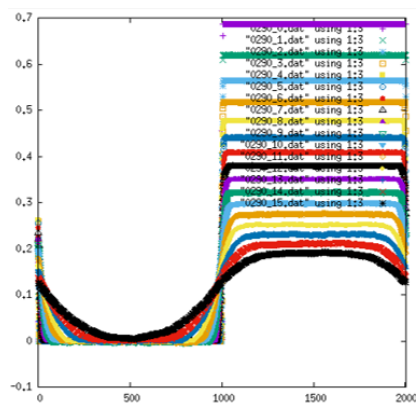


図6.66 T=0.29

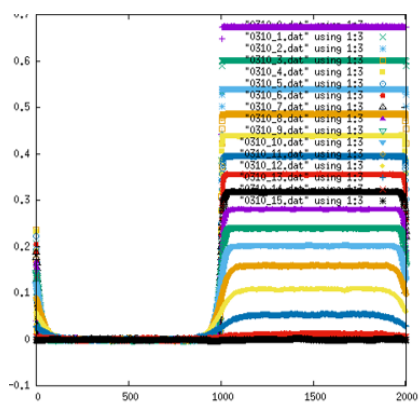


図6.67 T=0.31

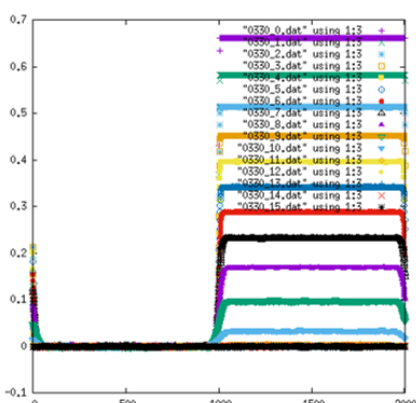
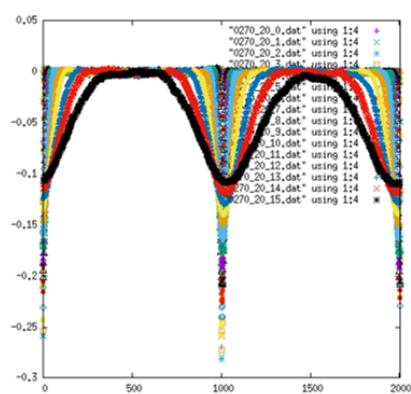
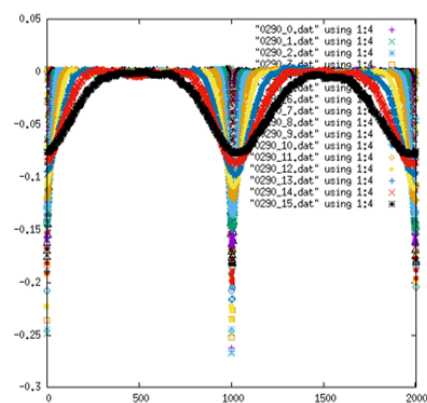
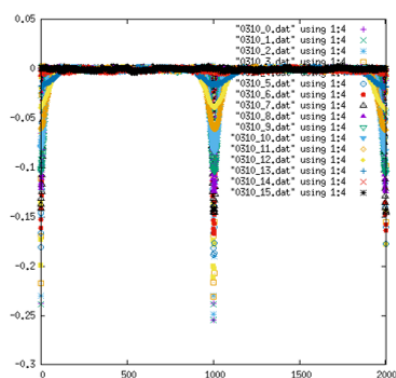
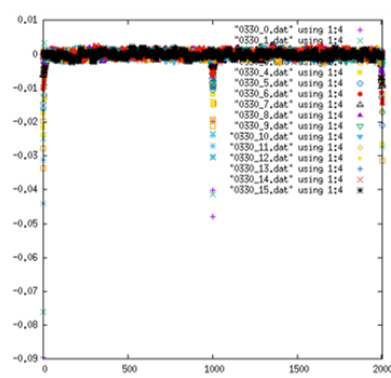


図6.68 T=0.33

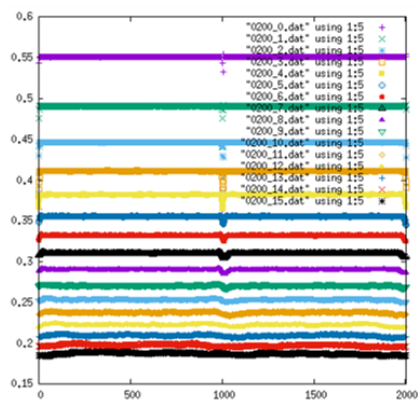
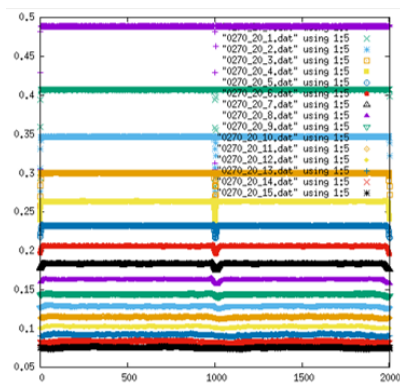
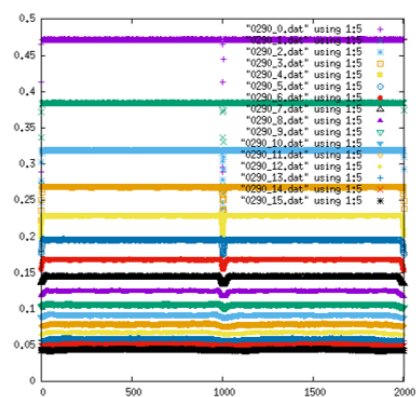
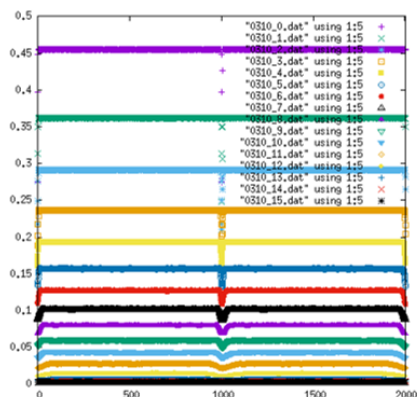
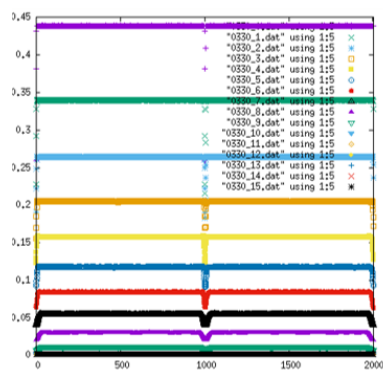
パターン2では初期条件の半分がベクトルカイラリティのY成分が1になるようにしている。したがって結果図の右半分が収束していく様子が観測された。その振る舞いは期待どおりZ成分の結果と各温度左右対称になっていることが確認できる。

ベクトルカイラリティ (X成分)

図6.69 $T=0.27$ 図6.70 $T=0.29$ 図6.71 $T=0.31$ 図6.72 $T=0.33$

また、Z成分とY成分に向けているため、X成分はどの部分においても0からの観測となる。高温から低温に向けて見ていけば、その境界の谷が形成されていく振る舞いを確認できる。

ベクトルカイラリティ (2 乗)

図6.73 $T=0.20$ 図6.74 $T=0.27$ 図6.75 $T=0.29$ 図6.76 $T=0.31$ 図6.77 $T=0.33$

振る舞いとしてはパターン 1 の結果と似ている。しかし、観測範囲内においてパター

ン1で見られたような明確な谷間が形成されることはなかった。

第7章

転移温度下における臨界指数

7.1 ゆらぎの緩和

低温相内においてオーダーパラメータは次の式(7.1)のようなべき緩和を、またゆらぎは式(7.2)のようにべき発散することが知られている。

$$fm = \langle m \rangle \simeq t^{-\frac{\eta}{2z}} \quad (7.1)$$

$$fmm = N_{sample} \left(\frac{\langle m^2 \rangle}{\langle m \rangle^2} - 1 \right) \simeq t^{\frac{d}{z}} \quad (7.2)$$

ここで m はパラメータの値、 t はステップ数、 d は次元（本系は $d=2$ ）、 N_{sample} である。2式より2つの量を独立に求められるため、この臨界指数 z と η を求めることができる。

この手法を用いて、2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型の低温相の振る舞いを調べる。低温相内を詳しく調べるため、計算においては動的スケーリング解析の結果による転移温度である0.2767度と、それより低温の温度を4か所計算した。そして、十分なサンプル数を用いた。それぞれの温度における、オーダーパラメータの緩和 fm とゆらぎの緩和 fmm の各計算結果は図7.1～7.4のとおりである。図の紫線が転移温度 $T_c = 0.2767$ で、順に $T = 0.2000$ (緑線), 0.1000 (水色), 0.0500 (橙線), 0.0100 (黄線)と低温に向かっていく。オーダーパラメータはベクトルカイラリティのZ成分と2乗である。いずれも横軸 t が時間（step数）で両対数プロットしたものになる。式のとおりオーダーパラメータ fm は t のべき乗で0に向かって緩和していく様子が、また、ゆらぎ fmm の方は t のべき乗で発散する様子が見られることから、この観測範囲内で臨界的なべき的振る舞いが見えていくことがわかる。

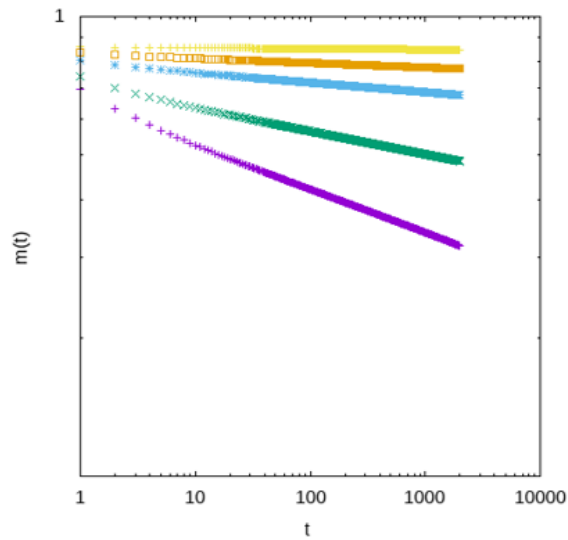


図7.1 オーダーパラメータの緩和 $fm : \kappa_z$

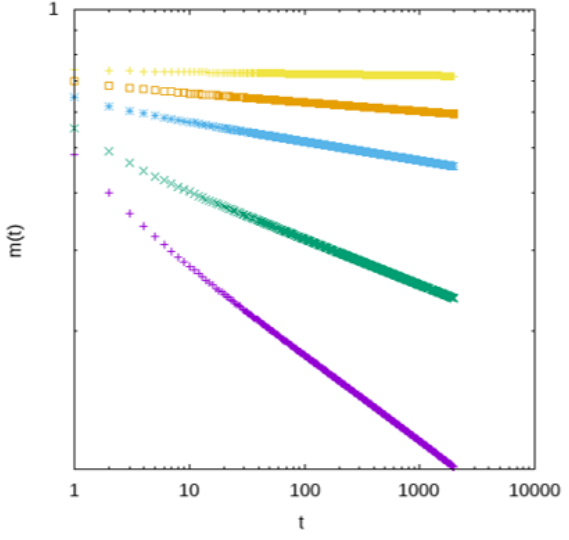


図7.2 オーダーパラメータの緩和 $fm : |\kappa|^2$

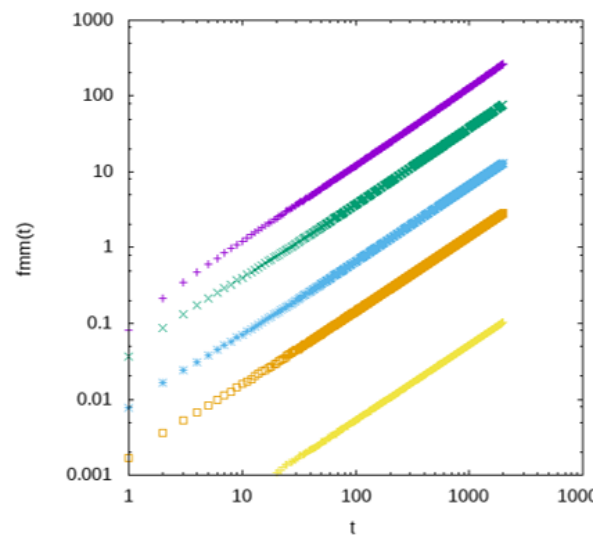


図7.3 ゆらぎの緩和 $fmm : \kappa_z$

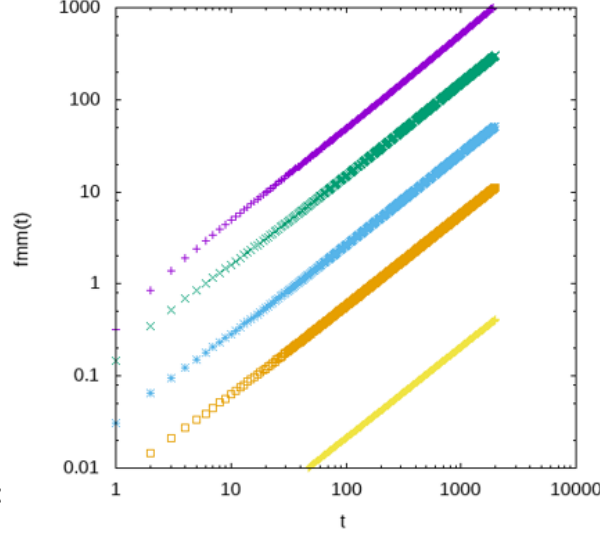


図7.4 ゆらぎの緩和 $fmm : |\kappa|^2$

表7.1 計算条件

Size	Sample	Step	Temperature
1001×1002	3003240	2000	0.0100～0.2767

式7.1,7.2における t の指数部分を

$$\lambda_m = -\frac{\eta}{2z} \quad (7.3)$$

$$\lambda_{mm} = \frac{2}{z} \quad (7.4)$$

と置き換え、この連立方程式を解くと次のように臨界指数 z や η の式を求められる。

$$z = \frac{2}{\lambda_{mm}} \quad (7.5)$$

$$\eta = -\frac{4\lambda_m}{\lambda_{mm}} \quad (7.6)$$

上式を元にプロットしたのが図7.5～7.8である。なお、横軸は $1/t$ となっている。

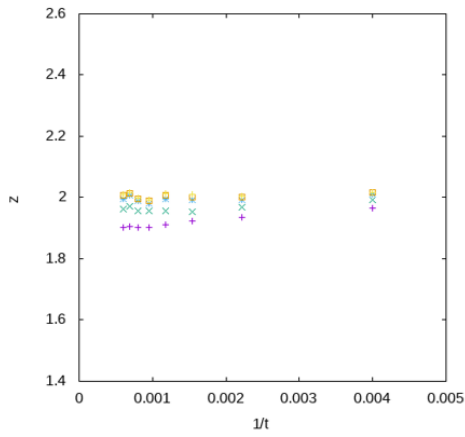


図7.5 臨界指数 z : κ_z

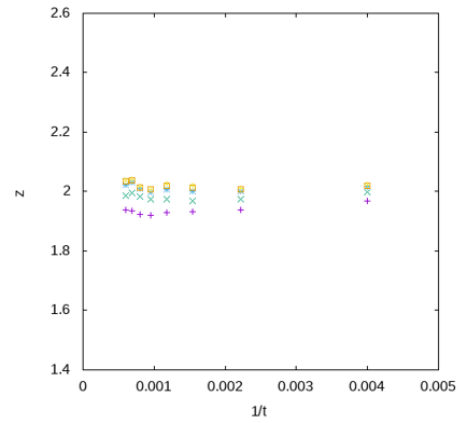


図7.6 臨界指数 z : $|\kappa|^2$

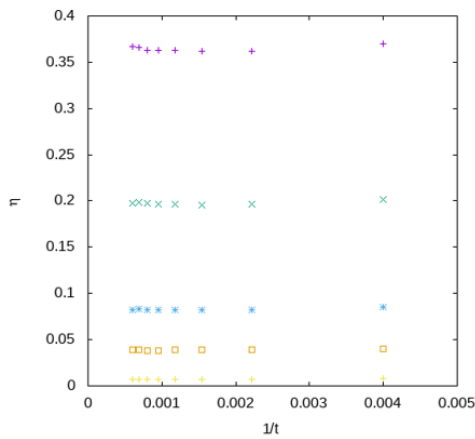


図7.7 臨界指数 η : κ_z

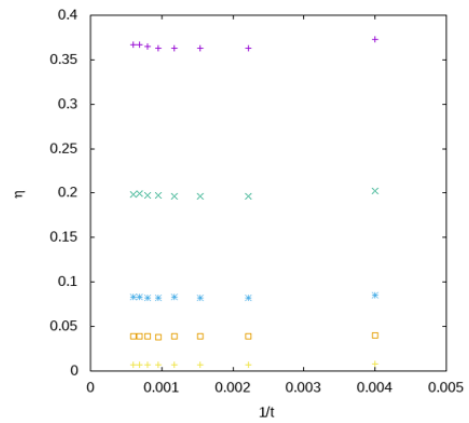


図7.8 臨界指数 η : $|\kappa|^2$

7.2 臨界指数 z 、 η の結果と考察

先ほどプロットした図7.5～7.8の $1/t = 0$ のときの漸近値が求める臨界値である。図のプロット点は各オーダーパラメータのいずれの温度もほぼ一定であるので結果が収束していることが期待される。これらの図を元に各温度ごとに臨界指数 z 、 η を算出し、まとめた結果が図7.9・図7.10である。図7.9より、 z についてはほぼ2であり温度とともに少し小さくなっていることがわかる。また η については、図7.10より有限の微分で立ち上がり、下に凸で増加する結果となった。また、転移温度における臨界指数の結果を比較したのが表7.2になる。転移温度上では z はいずれも2付近で評価、 η は模型によって違うといった結果となっている。

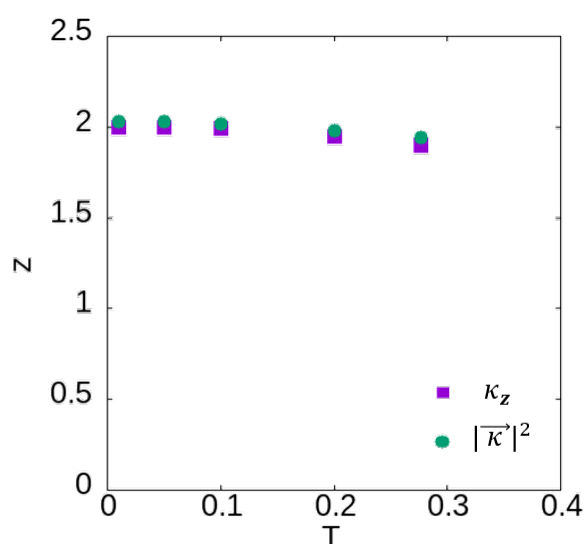


図7.9 臨界指数 z (2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型)

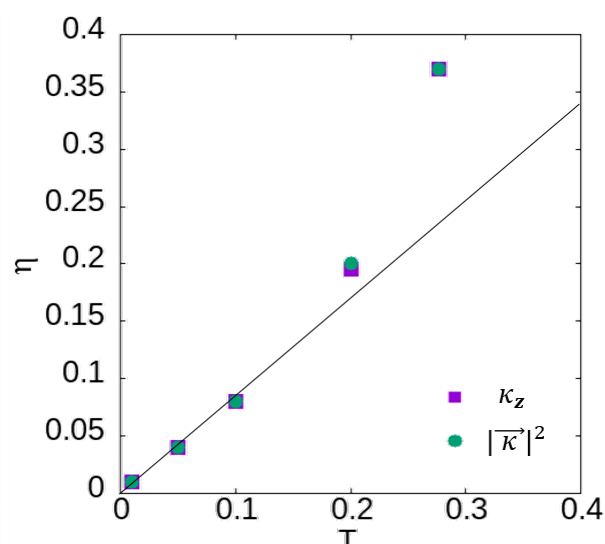
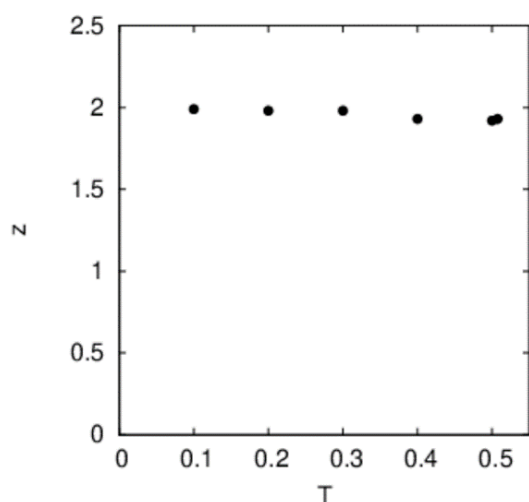
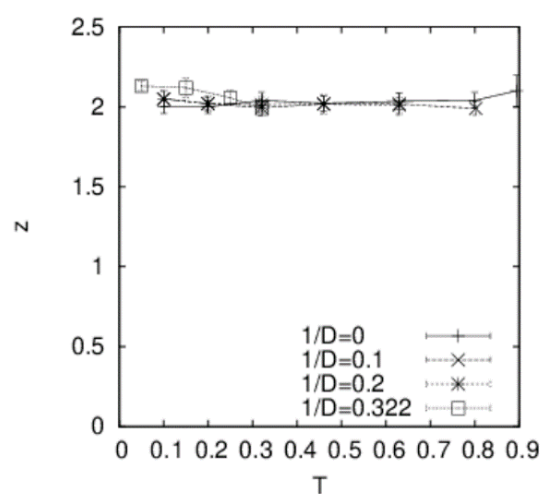
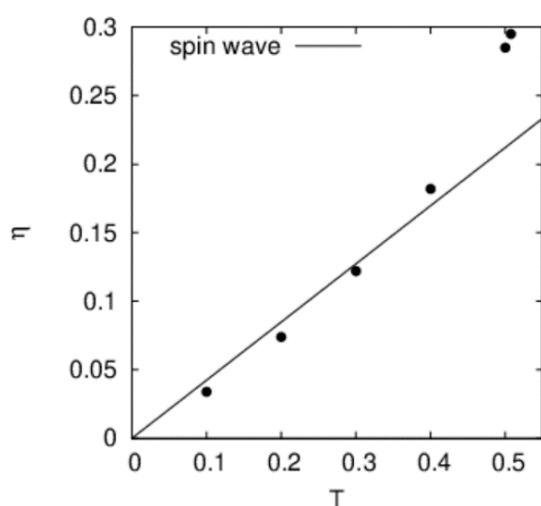
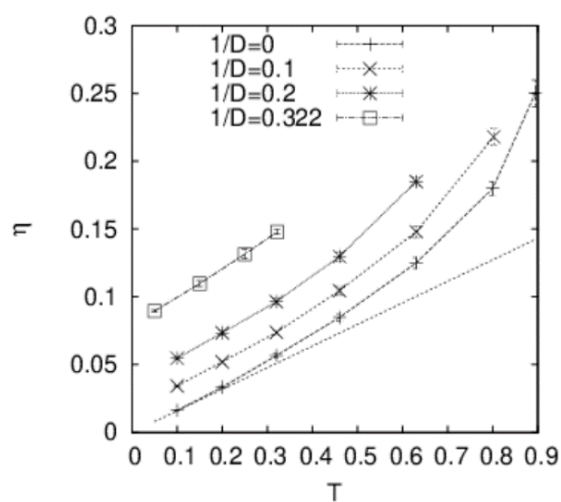


図7.10 臨界指数 η (2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型)

表7.2 転移温度における臨界指数の結果と比較

Model	z	η
Heisenberg-AFT(κ_z)	1.90	0.370
Heisenberg-AFT($ \kappa ^2$)	1.95	0.370
XY-FM[1]	2.10(10)	0.25(1)
XY-AFT[1]	1.90(15)	0.310(15)
RP^2 [25]	1.90	0.290

また、これらの振る舞いを先行研究の他のKT転移の結果と比較する。ここで比較対象を、KT転移を示す、2次元 RP_2 模型（図）と強磁性XY模型（図）とする。XY模型は $1/D = 0$ が純粋な強磁性の結果となっている。まず z について比較してみると、本系と他のKT転移と臨界指数の振る舞いが定性的によく似ていることがわかる。 η の振る舞いにおいては、低温において0から出発するのは他のKT転移においてもそうであることがわかり、こちらも定性的によく似た結果となった。

図7.11 臨界指数 z （2次元 RP^2 模型）[25]図7.12 臨界指数 z （強磁性XY模型）[26]図7.13 臨界指数 η （2次元 RP^2 模型）[25]図7.14 臨界指数 η （強磁性XY模型）[26]

第III部

結論

第8章

まとめ

8.1 結論

フラストレートしたハイゼンベルグ模型の相転移の解析を目的とし、様々な計算シミュレーションや解析などを行ってきた。その結論について端的にまとめる。

2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型

Z_2 ボルテックス転移の有無が課題になっている2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型において、非平衡緩和法により相転移の振る舞いが確認され、それはXY模型などにおいてよく知られているKT転移の緩和の式に非常によく似ていた。

そこで動的スケーリング解析を行った結果、関数無仮定のプロット点にKT転移を仮定した結果が載り、本系がKT転移である可能性を高めた。また尤度や残差といった観点から見てもKT転移を指し示すに十分値する結果を示した。この結果より強調すべき点は、本系がKT転移として解析して相転移がきちんと解析されて、かつ、今までの転移温度の結果を踏襲していたことにより、本系に示唆されている相転移の存在を強く示したということである。

さらにゆらぎを解析した結果、転移温度上および低温相の臨界指数の振る舞いが他のKT転移を示す模型と定性的に一致する結果となった。すなわち、本系の低温相はKT相であることが示唆された。

動的スケーリング解析における緩和時間の関数形は、一般的なKT転移の τ の関数形 $\tau(T) \sim \exp(b/\sqrt{T-T_c})$ であるとし、各パラメータを算出した。各パラメータは、動的スケーリング解析より転移温度 T_c と臨界指数 λ が、ゆらぎの解析から臨界指数 z と η が信憑性の高い結果として得られた（表8.1）。

表8.1 2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型のパラメータ結果

秩序変数	T_c	λ	z	η
κ_z	0.276	0.101	2.401	0.370
$\frac{\vec{\kappa}^2}{ \kappa }$	0.277	0.211	2.288	0.370

転移温度についての考察

転移温度 T_c は2つのオーダーパラメータにおけるそれぞれの結果を踏まえ、 $T_c = 0.2765(5)$ であると結論付ける（表8.2）。

表8.2 2次元三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型における転移温度の比較

Method	year	T_c
MC[4]	1984	0.31(1)
MC[5]	2010	0.285(5)
NER(Present Result)	2018	0.2765(5)

転移温度が先行研究に比べやや低温であるが、これは想定内の結果である。その理由として、従来の研究結果でサイズ依存性が克服しきれていないことが考えられる。平衡MC法においてサイズ依存性の影響が出てしまうと、正しい転移温度よりも高温寄りの結果となってしまう[23]。本研究結果はさておき、1984年の結果と2010年の結果を見ればその転移温度が大幅に低温側に修正されたことがわかる。すなわち本研究結果がサイズ依存性を完全に克服したものであると言えるならば、結果がやや低温の転移温度となったことは、これまでの傾向からしても十分に先行研究を踏襲している結果であるといえる。

フラストレート正方格子ハイゼンベルグ模型

一方でXY模型の事例より同じ普遍性であると予測されたフラストレート正方格子においては、ハイゼンベルグ模型では動的スケーリング解析でうまく収束しなかった。その原因としては緩和データにプラトーが現れたことによる。裏を返せば緩和データにプラトーが現れている時点で、反強磁性三角格子とは緩和の振る舞いが異なっているといえる。そのことから、同じフラストレートしている格子でも、これら2つは違う普遍性であるという可能性などが考えられた。

緩和時間 τ の関数形について

本研究におけるパラメータ結果では一般的なK T転移を仮定した関数形を採用したが、 Z_2 ボルテックス転移がトポロジカル相転移であるもののK T転移と明言されていないため他の関数形の可能性も考えられる。そのため比較として様々な関数形を仮定し解析を行った。しかし、本研究結果は動的スケーリング解析における緩和時間の比較の図や尤度・残差より、K T転移の関数形の結果には大きな差がなかった。そのためその関数形の細かな判別をつけることはできなかった。この点を解消すべく、動的スケーリング解析のさらなる改良など様々な試みを行ったが決着には至らなかった。その細かい議論は付録に記載する。

8.2 今後の課題

平衡MC法においても議論が停滞したままであるサブラティス磁化の解析は、非平衡緩和法においても同様に近い判別しにくい結果となった。またフラストレート正方格子においても明確な結論までは至っていない。また緩和時間 τ の関数形を定める決定的な研究結果は得られていない。こうした決着に至らない研究を、今後の課題とする。

付録

緩和時間 τ の関数形を決定するための試み

本編第5章より以前に算出された緩和データを用いた解析結果を用いている。オーダーパラメータはベクトルカイラリティであり、条件は第5章と同じであるが、計算スケールや温度範囲が異なっている。計算条件は本編が4000に対し、こちらのサイズが2000であり、サイズ依存性が出ている可能性がある。また、この段階における緩和データの取り方は節4.2.3の改良前であることにも留意する。緩和データを比較してみると第5章のものと比べ、図8.2は温度に関係なく均一にデータを抽出していることがわかる。このようにデータ結果としては古いものであるが、本編のデータでは行っていない研究や解析を行っているため、参考データとして付録という形で記載する。

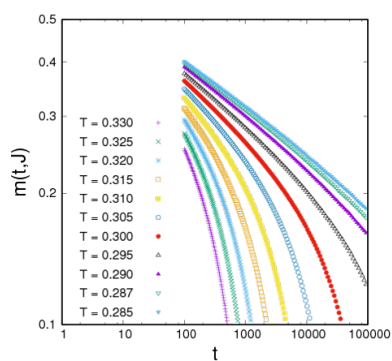


図8.1 ベクトルカイラリティ κ_z

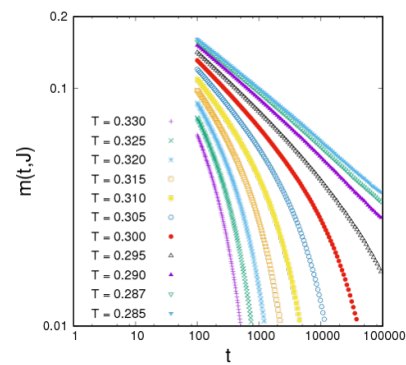


図8.2 ベクトルカイラリティ $|\kappa|^2$

表8.3 計算条件

Size	Sample	Step	Temperature
2000×2001	864	100000	0.285～0.330

スケーリングプロット

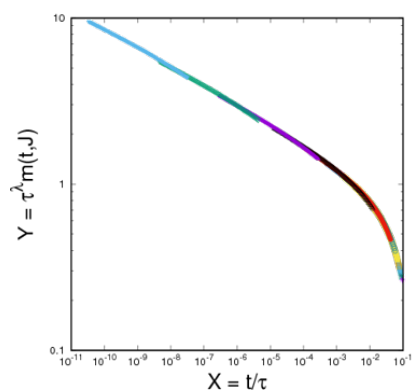


図8.3 KT転移仮定： κ_z

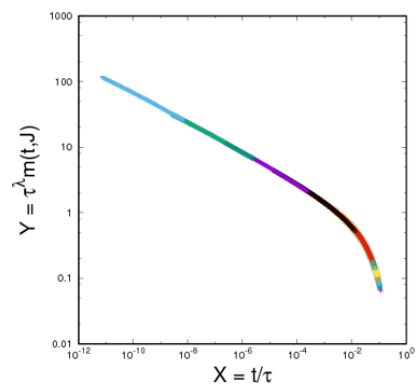


図8.4 KT転移仮定： $|\kappa|^2$

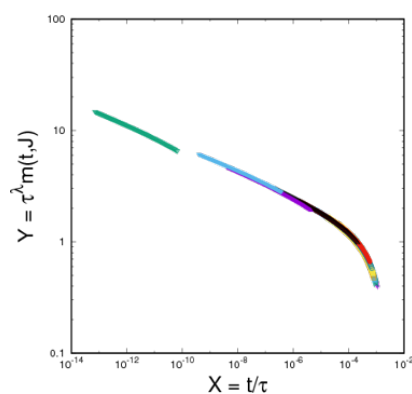


図8.5 2次転移仮定： κ_z

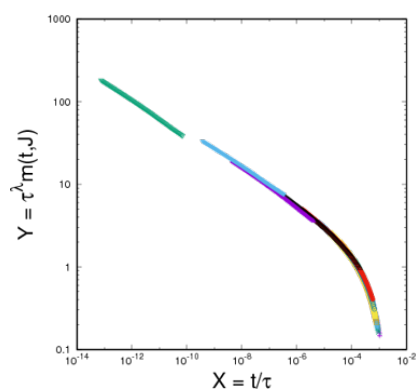


図8.6 2次転移仮定： $|\kappa|^2$

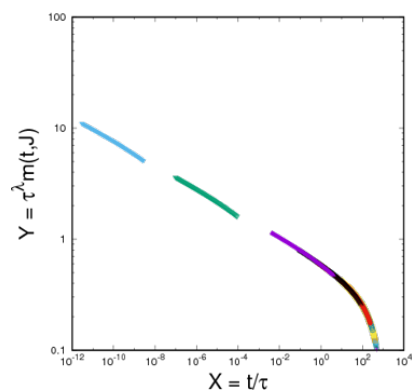


図8.7 関数無仮定： κ_z

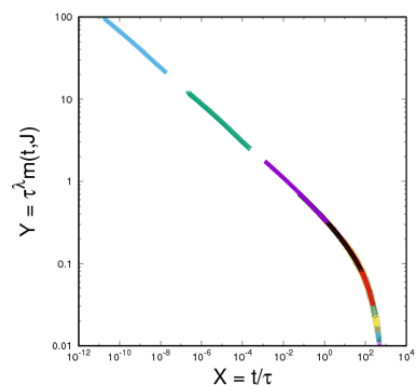
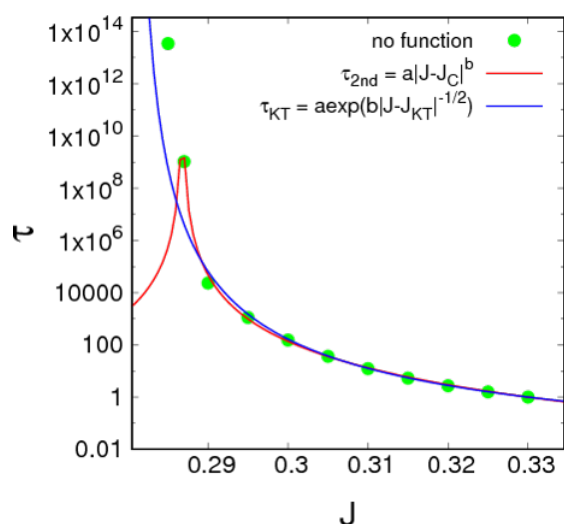
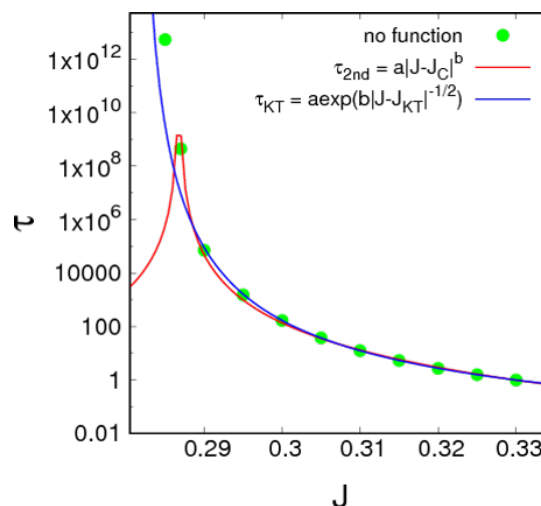


図8.8 関数無仮定： $|\kappa|^2$

解析結果の比較

図8.9 比較結果： κ_z 図8.10 比較結果： $|\kappa|^2$

パラメータ結果の比較

表8.4 パラメータ比較結果： κ_z

関数形	相転移	T_c	λ	z	尤度	残差
$\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$	KT	0.2801	0.110	1.90	4209	1.39E+01
$\tau(T) \sim a T - T_c ^{-b}$	2nd	0.2868	0.104	4.15	3027	2.94E+01
無仮定	-	-	-	-	5090	-

表8.5 パラメータ比較結果： $|\kappa|^2$

関数形	相転移	T_c	λ	z	尤度	残差
$\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$	KT	0.2813	0.218	1.85	4185	6.38E+00
$\tau(T) \sim a T - T_c ^{-b}$	2nd	0.2868	0.203	4.15	2207	2.37E+01
無仮定	-	-	-	-	4846	-

本編においては動的スケーリング解析の結果、転移温度 $T_c = 0.2765$ であったが、ここで用いている緩和データの結果は転移温度は $T_c = 0.28$ であり、ずれが生じている。残差が本編の結果と比べかなり大きく、精度の差（本論における結果の精度の良さ）が示されている。

定数の最適化による τ の推測

動的スケーリング解析で得た結果のパラメータをもとに、その定数がより最適化されるように（無仮定の結果に近づくように） a, b を推定した。

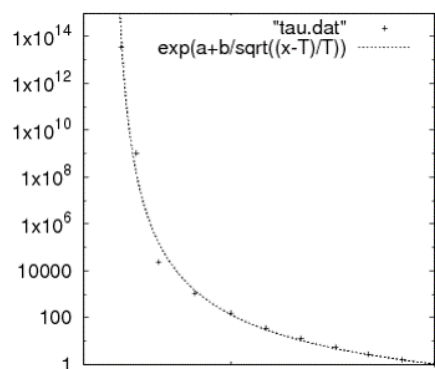
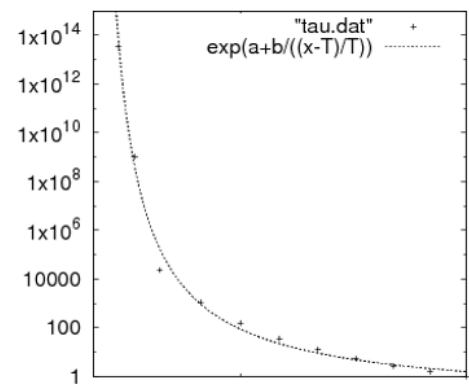
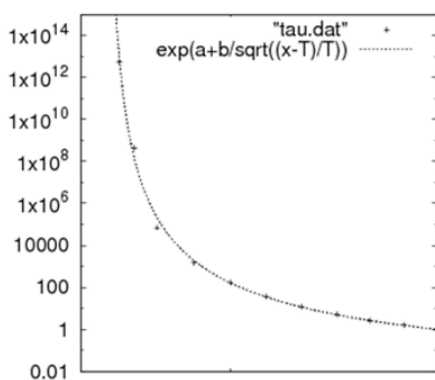
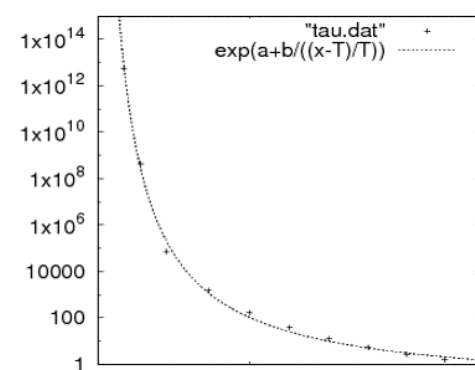
図8.11 定数最適化： κ_z 図8.12 定数最適化： $|\vec{\kappa}|^2$ 図8.13 定数最適化： κ_z 図8.14 定数最適化： $|\vec{\kappa}|^2$ 表8.6 緩和時間 τ の関数形の最適化

図	関数形	秩序変数	T_c	a	$b(z)$	残差
8.11	$\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$	κ_z	0.2834	-7.16	2.92	8.17
8.12	$\tau(T) \sim a \exp(b/(T - T_c))$	κ_z	0.2814	-2.02	0.43	6.46
8.13	$\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$	$ \vec{\kappa} ^2$	0.2830	-7.71	3.14	2.81
8.14	$\tau(T) \sim a \exp(b/(T - T_c))$	$ \vec{\kappa} ^2$	0.2808	-2.28	0.475	2.34

最適化定数を初期値にした動的スケーリング解析

先の最適化定数を動的スケーリング解析の初期値にした。これは解析結果の精度を高めることを目的とする。用いたのはそれぞれのp4とp7である。

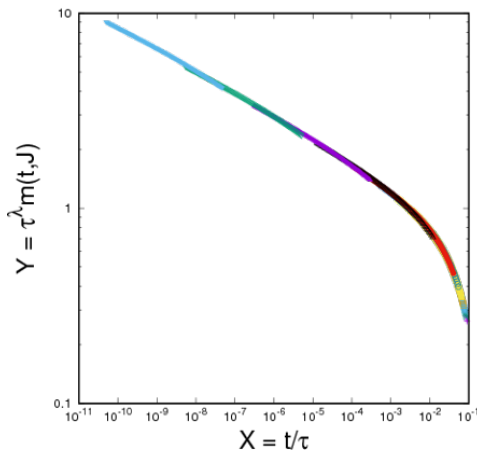


図8.15 スケーリングプロット： κ_z

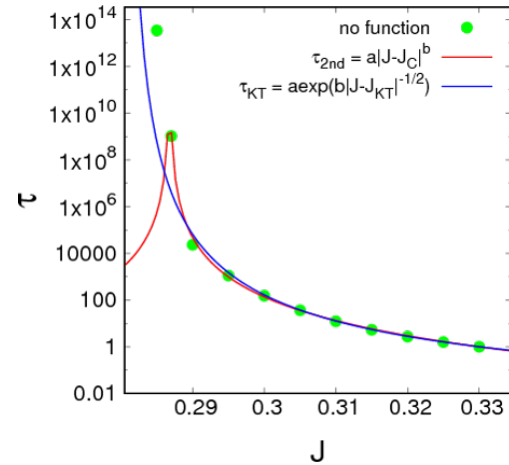


図8.16 結果の比較： κ_z

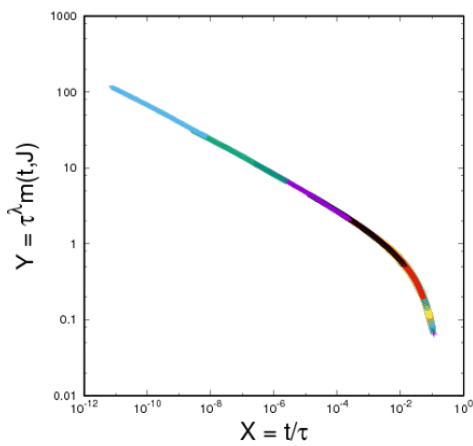


図8.17 スケーリングプロット： $|\kappa_z|^2$

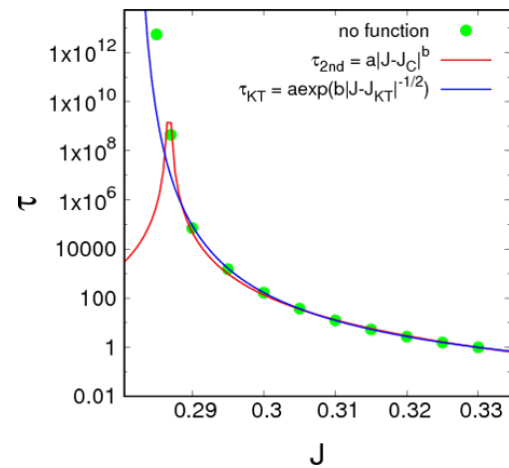


図8.18 結果の比較： $|\kappa|^2$

表8.7 パラメータ比較結果

関数形	秩序変数	T_c	λ	z	尤度
$\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$	κ_z	0.2804	0.110	1.92	4207
$\tau(T) \sim a \exp(b/\sqrt{T - T_c})$	$ \vec{\kappa} ^2$	0.2813	0.218	1.85	4185

表8.4,8.5とこの表8.7を比較してわかるように最終的には元と似た結果に収束した。

パラメータp8の導入

先ほどの結果より、一般的なルートありのKT転移の関数形の他にも候補が挙げられた。その判別をすべく、KT転移の他の関数形でも動的スケーリング解析を行いたい。そのために、動的スケーリングの解析プログラムの改良を行った。本論では他の関数形を仮定した解析も行っているが、研究の時系でいうとここではじめて実装された。

KT転移の動的スケーリング解析はp1～p7のパラメータで構成されている。現在、課題として挙げられてるのは式

$$\tau(T) \sim a \exp(b|T - T_c|^c) \quad (8.1)$$

における、 $T - T_c$ のべき部分のパラメータ c の値についてである。よって、この c を新たにパラメータp8となるようプログラムを改良した。この新たなパラメータp8と従来のパラメータをまとめたのが表8.9である。ただしp6は実質変動なし(p6=0)となっている。このパラメータp8を固定し、べきを少しずつ変えて動的スケーリング解析を行った。このとき、p8=-1.00, -0.75, -0.60, -0.45, -0.40, -0.35, -0.33, -0.30, -0.25とし、オーバーパラメータはベクトルカイラリティのZ成分のデータ8.2を用いた。解析結果はすべて収束した。

表8.8 動的スケーリング解析のパラメータ

p1	p2	p3	p4	p5	p6	p7	p8
th_1	th_2	th_0	T_c	λ	$\log a(=0)$	$b(z)$	c

スケーリングプロット

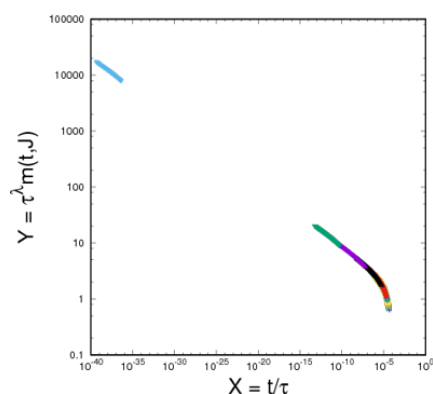


図8.19 p8=-0.25 : κ_z

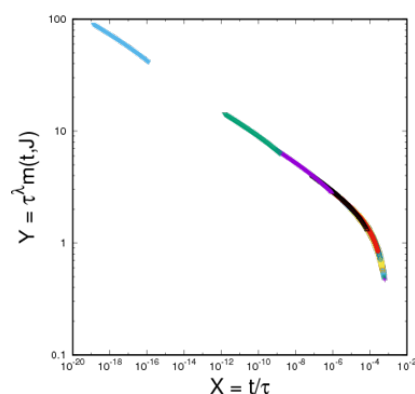


図8.20 p8=-0.30 : κ_z

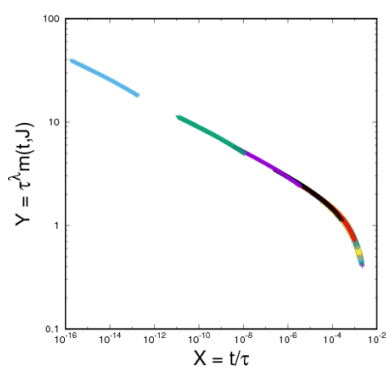


図8.21 $p8=-0.33 : \kappa_z$

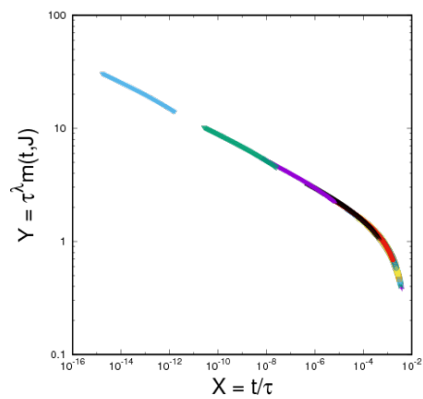


図8.22 $p8=-0.35 : \kappa_z$

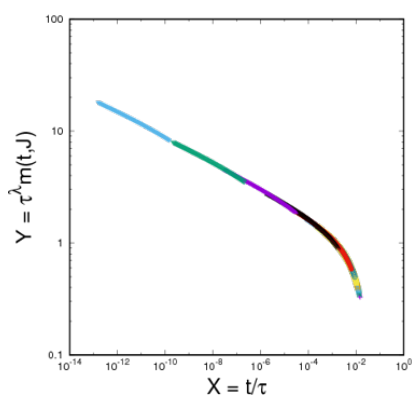


図8.23 $p8=-0.40 : \kappa_z$

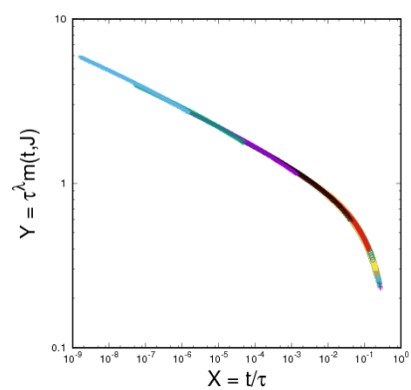


図8.24 $p8=-0.60 : \kappa_z$

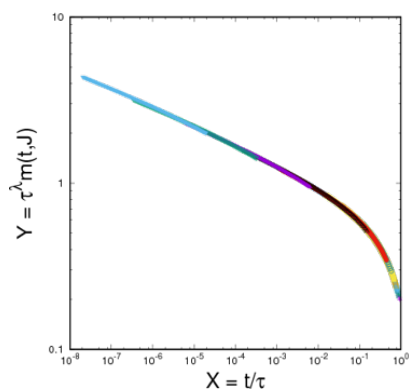


図8.25 $p8=-0.75 : \kappa_z$

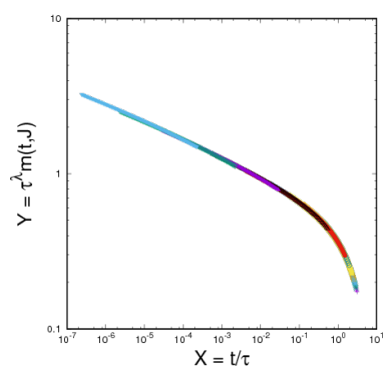
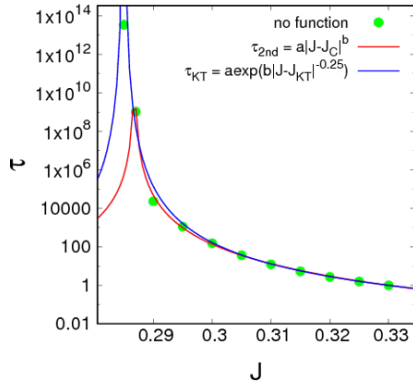
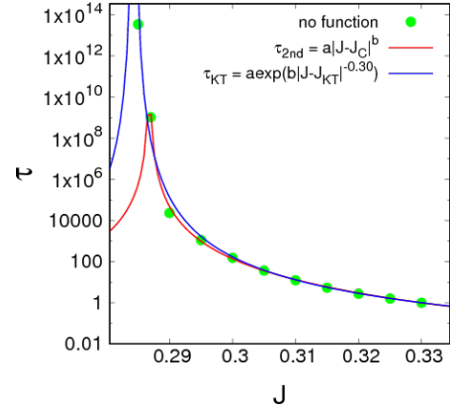
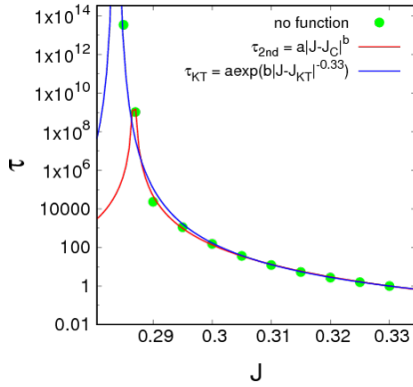
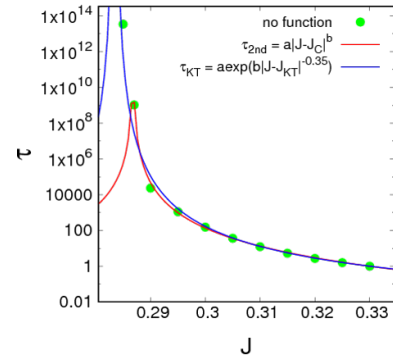
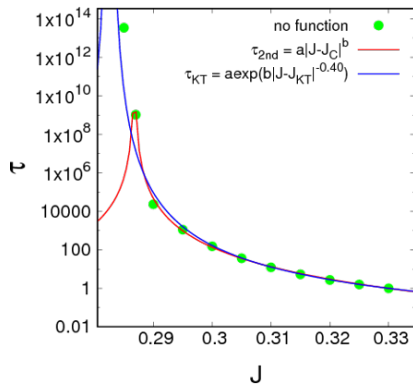
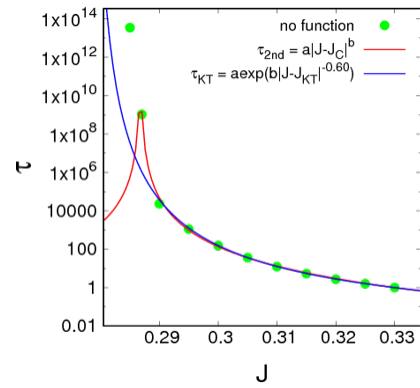
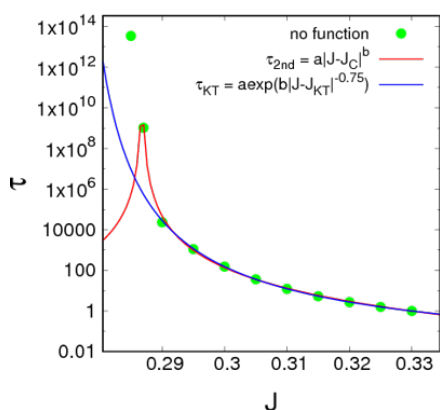
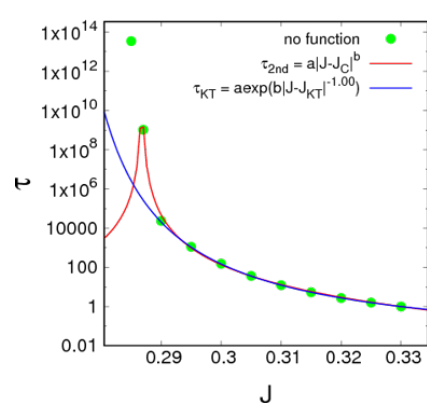


図8.26 $p8=-1.00 : \kappa_z$

関数無仮定との比較

図8.27 $p8=-0.25 : \kappa_z$ 図8.28 $p8=-0.30 : \kappa_z$ 図8.29 $p8=-0.33 : \kappa_z$ 図8.30 $p8=-0.35 : \kappa_z$ 図8.31 $p8=-0.40 : \kappa_z$ 図8.32 $p8=-0.60 : \kappa_z$

図8.33 $p8=-0.75 : \kappa_z$ 図8.34 $p8=-1.00 : \kappa_z$

パラメータ結果比較

表8.9 動的スケーリング解析のパラメータ

p1	p2	p3	p4	p5	p6	p7	p8	尤度	残差
th_1	th_2	th_0	T_c	λ	$\log a$	b	c	-	-
-4.12	3.03	6.09E-03	0.2850	0.112	0.00	7.47E+00	-0.25	3874	2.09E+02
-6.61	3.99	5.57E-03	0.2843	0.113	0.00	5.37E+00	-0.30	3976	1.91E+01
-5.56	3.69	-5.23E-03	0.2837	0.112	0.00	4.42E+00	-0.33	4040	1.88E+01
-5.12	3.56	-5.08E-03	0.2834	0.112	0.00	4.02E+00	-0.35	4070	3.11E+00
-4.53	3.33	-4.70E-03	0.2825	0.112	0.00	3.08E+00	-0.40	4143	7.02E+00
-4.49	3.20	4.46E-03	0.2816	0.111	0.00	2.40E+00	-0.45	4192	1.07E+01
-3.52	2.90	-4.39E-03	0.2806	0.110	0.00	1.90E+00	-0.50	4209	1.39E+01
-2.45	2.55	-4.18E-03	0.2779	0.108	0.00	1.27E+00	-0.60	4294	2.17E+01
-2.36	2.39	3.56E-03	0.2748	0.107	0.00	1.07E-01	-0.75	4457	2.60E+01
7.36	3.30	3.21E-03	0.2695	0.105	0.00	3.07E-01	-1.00	4589	3.07E+01

パラメータのp8依存性

尤度、残差は、相転移の識別の指標にはなるが、さらに関数形の細かい部分を判定するには厳しいということがわかった。p5(λ)がほぼ一定である一方、p7(b)が大きく変わるため、この値がわかれば特定の手掛かり繋がるのではないかと考えられる。

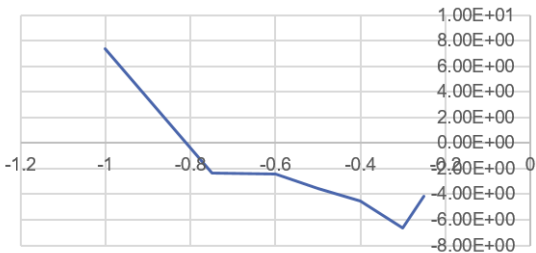


図8.35 p1

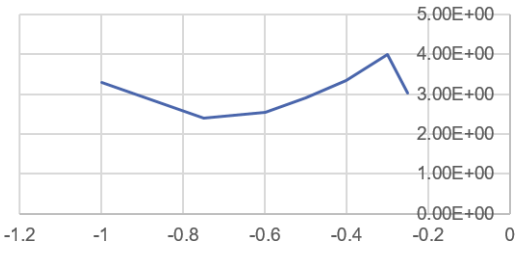


図8.36 p2

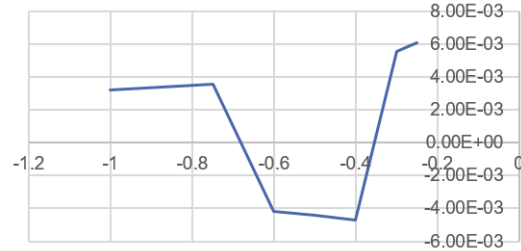


図8.37 p3

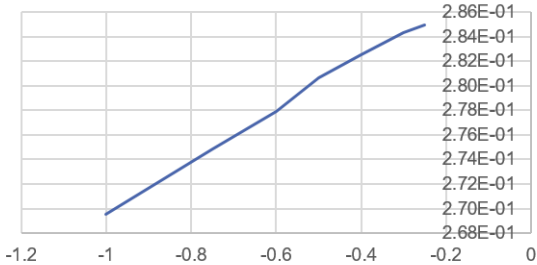


図8.38 p4 (T_c)

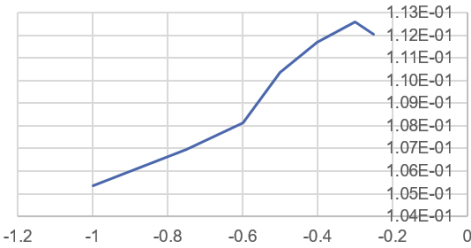


図8.39 p5 (λ)

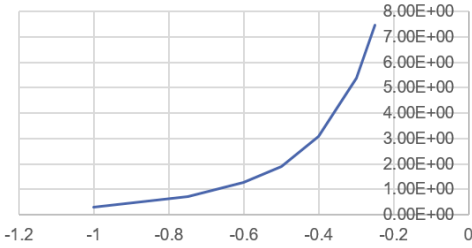


図8.40 p7 (b)

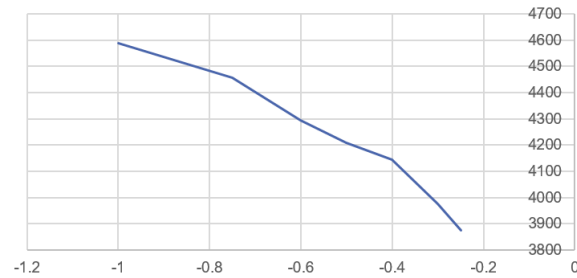


図8.41 尤度

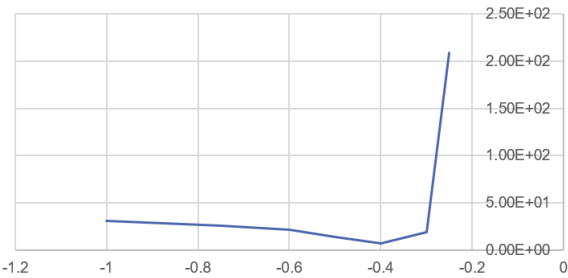


図8.42 残差

定数最適化した結果の比較

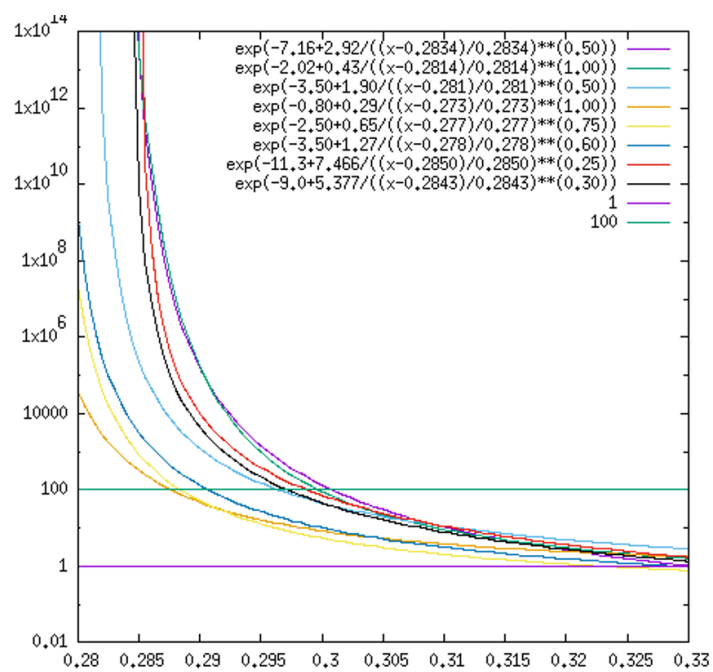


図8.43 結果比較

パラメータp8を動かす

パラメータp8の決定までもを動的スケーリング解析で自動で算出してくれることを期待した。これまでの解析において、パラメータを動かすシェルスクリプトは次の文が用いられてきた（図8.44）。なおここでソース内におけるefは解析プログラム実行ファイル、dfは緩和データファイル、pfはパラメータデータファイルを示す。0010000のように並ぶ数字は従来までのp1～p7の7つのパラメータを表しており、0は固定、1は変動させるように命令される。図のように、解析においては一度にすべてのパラメータを動かすのではなく1～3個のパラメータだけを選択し変動させる。この動かし方は解析プログラム作成者による経験則によるものである[19]。ここに新たに導入したパラメータp8を追加した。追加においては従来のプログラムに沿って様々なパターンを試みたが、後述のとおりうまくいかなかった。その結果の一例（p8初期値=-0.75）を挙げる。

```
for i in `seq 1 1 30`
do
./${ef} ${df} ${pf} 0 0 1 0 0 0 0
./${ef} ${df} ${pf} 1 1 0 0 0 0 0
for j in `seq 1 1 2`
do
./${ef} ${df} ${pf} 0 0 0 0 1 0 1
./${ef} ${df} ${pf} 0 0 0 1 0 0 0
done
./${ef} ${df} ${pf} 0 0 0 1 1 0 1
done
```

図8.44 プログラムrun.shより一部抜粋

表8.10 動的スケーリング解析のパラメータ

	p1	p2	p3	p4	p5	p6	p7	p8
	th_1	th_2	th_0	T_c	λ	$\log a$	b	c
p8可変	-4.33	2.77	5.44E-03	0.2770	0.111	0.00	6.52E-01	-0.750005777
p8不変	-2.36	2.40	3.56E-03	0.2743	0.107	0.00	7.14E-01	-0.750000000

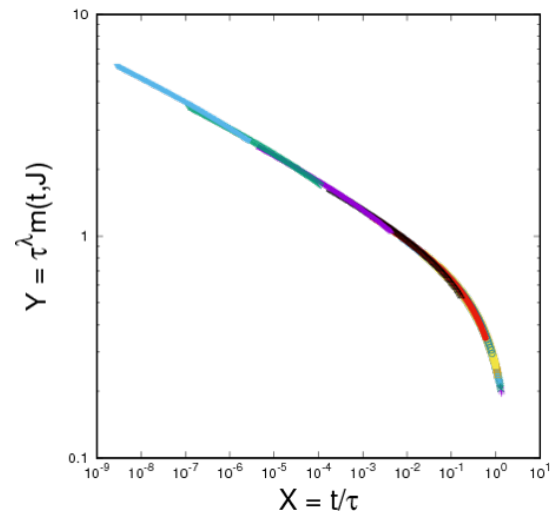


図8.45 スケーリングプロット (p8可変)

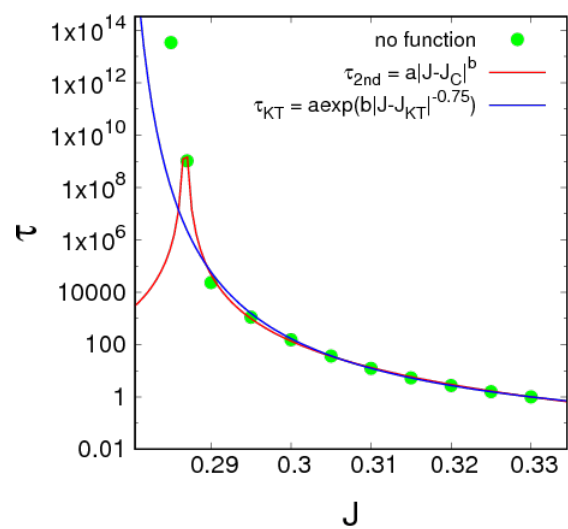


図8.46 比較結果 (p8可変)

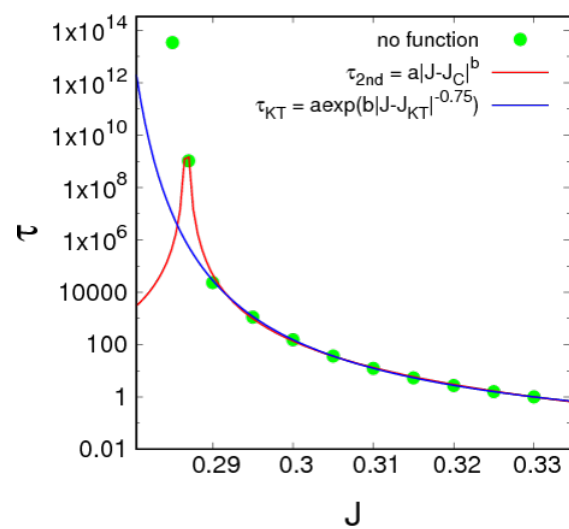


図8.47 比較結果 (p8不変)

表8.11 動的スケーリング解析のパラメータ

	尤度	残差
p8可変	4023	1.84E+01
p8不変	4457	2.60E+01

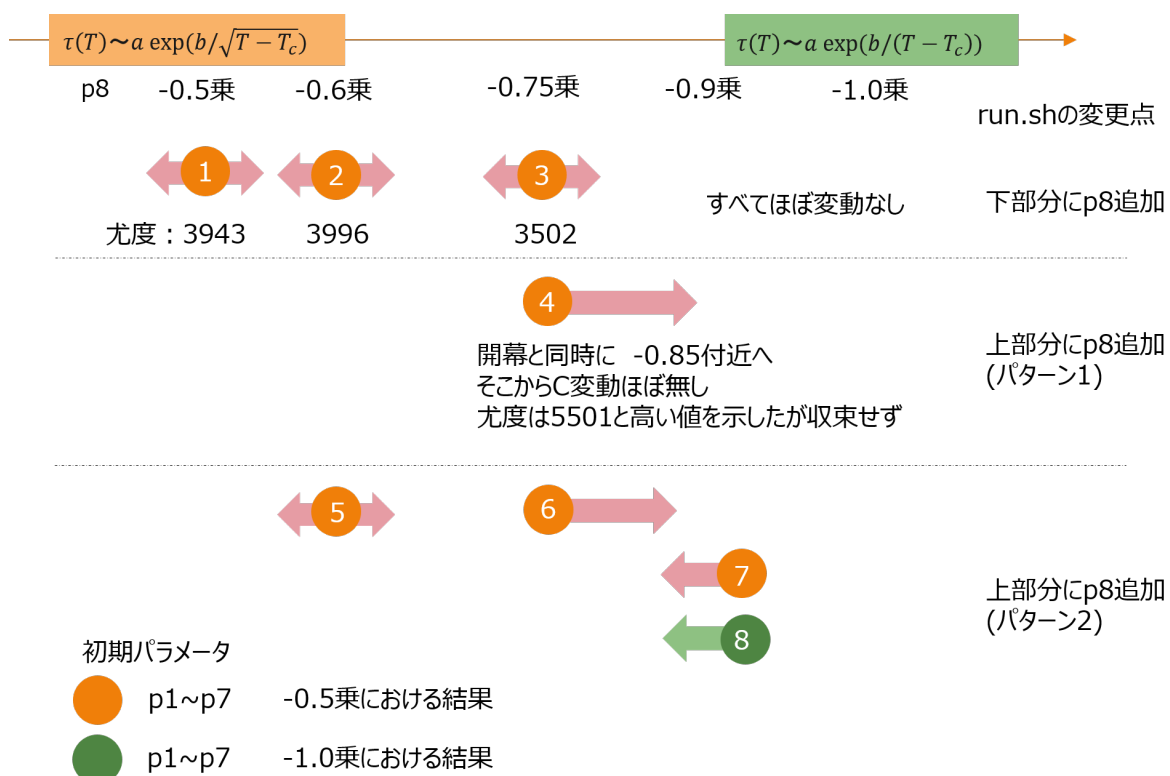


図8.48 p8の変動例

この結果について考察する。まずp8を確認すると（表8.10）、p8可変の結果においてわずかだが値が変動している。すなわちプログラム上では期待通り動いてくれていることがわかる。しかし、期待したのはそのp8がさらに大幅に、すなわちオーダーで言えば0.1～1.0刻みで動いてくれることであった。これを解決すべく、パラメータの動かし方において、シェルスクリプト内での場所や同時に動かす個数、初期パラメータの変更など様々な試行をしたが、期待される変動はなかった(図8.48)。同じp8=-0.75という初期条件から始まっても動かし方によって結果の終着点が違ってしまったというところは、特に大きな問題点である（4番のように尤度が高いけれども結果として収束しないものもあった）。また、尤度と残差について見てみると、尤度は不変が、残差は可変の結果が優勢となっており、結果の優劣が付きにくくなっている（表8.11）。結局のところ、動的スケールリング解析において様々な終着点が存在し、そしてp8のべきの影響が特に強いためこの値を安直に変えることはできないと結論付けた。より動的スケールリング解析を汎用性の高いものにすべきならば、この点の改善も望まれる。

さらに別の関数形の可能性について

さらに別の関数形の可能性を考え、次の式

$$\tau(T) \sim a|T - T_c|^d \exp(b|T - T_c|^c) \quad (8.2)$$

においても動的スケーリング解析を行った。解析を行うにおいて新しいパラメータ $p9=d$ を導入した。解析においては $p8=c$ を固定にし、 $c=-0.5, -1.0$ とした。

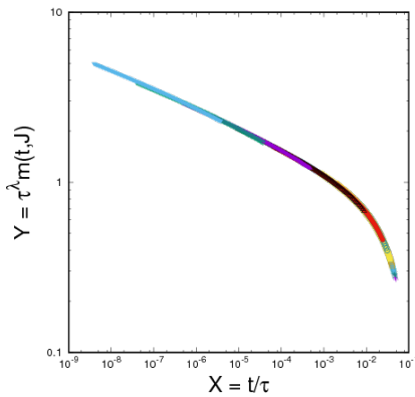


図8.49 $p8=-0.50 : \kappa_z$

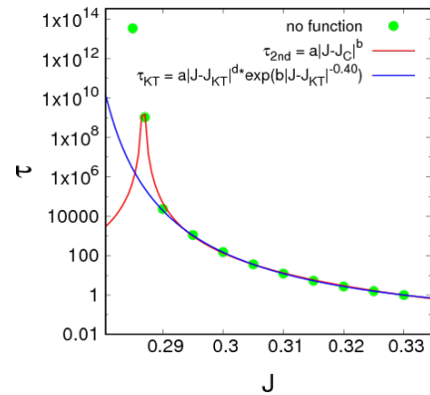


図8.50 $p8=-0.50 : \kappa_z$

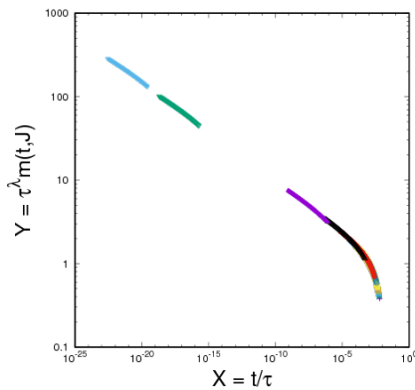


図8.51 $p8=-1.00 : \kappa_z$

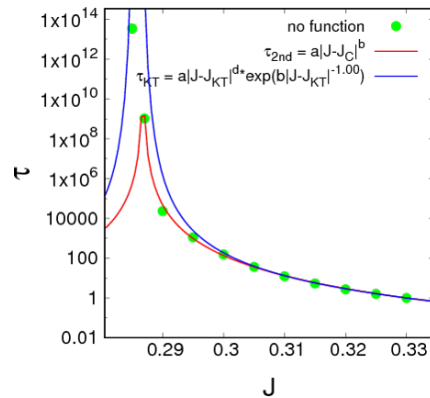


図8.52 $p8=-1.00 : \kappa_z$

図より、いずれの結果も収束した。しかし比較結果としてはこれまでの関数形より離れており、またこの関数形が正しいという物理的根拠もないため、この関数形の可能性は低いのではないかと結論付けた。ただしこの結果だけで完全に否定されたとはまでは言えないことに注意する。

緩和時間 τ の関数形についてはこのような経緯を経て、サイズ依存性や解析におけるデータの取り方を見直し、第5章の結果へとたどり着いた。

計算高速化のための試み

本研究では大規模な計算をするため、できるだけ時間効率の良いプログラムを作ることが基本となる。例えばプログラム内に極力if文などの条件分岐を作らないようにすることなどが挙げられる。それに加え計算を高速にするため、オーバーリラクゼーションアルゴリズム[27]とよばれるプログラムの実装や、GPU計算機の使用などを試みた。ただし本編の研究結果においては結局使っておらず、また本研究目的とも異なるため付録という形で記載する。

オーバーリラクゼーション

オーバーリラクゼーションをプログラムの1step毎に適当回繰り返させることで、時間は遅くなるが緩和を早めることができる。原理などは割愛し結果と考察のみ記載する。

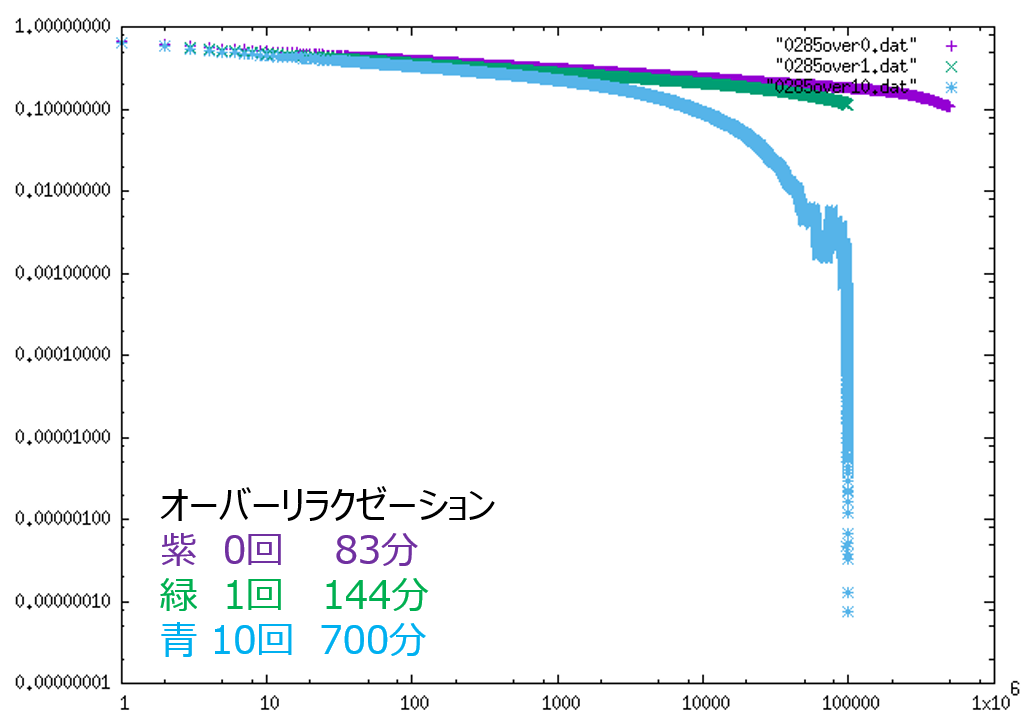
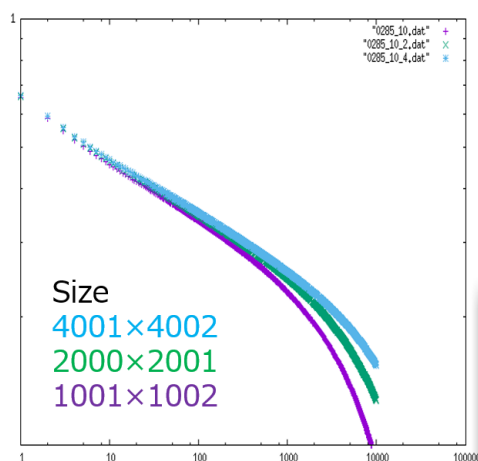
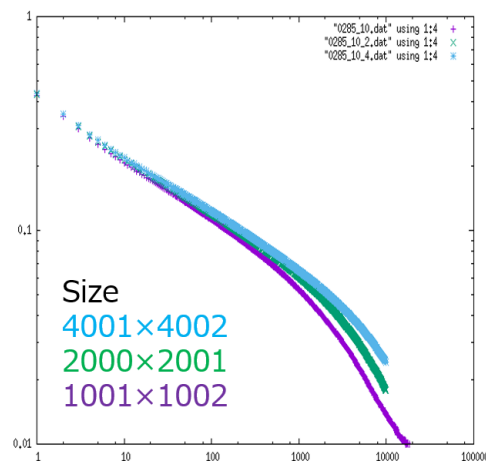


図8.53 オーバーリラクゼーションの実装

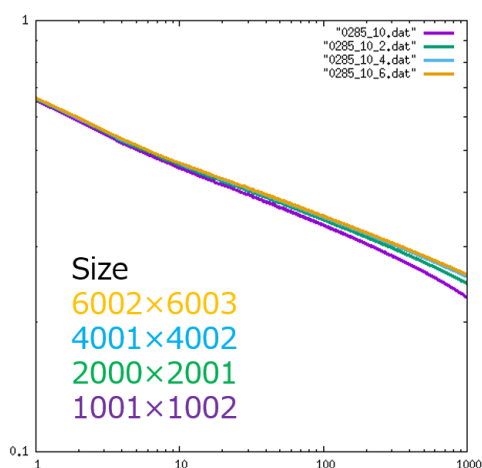
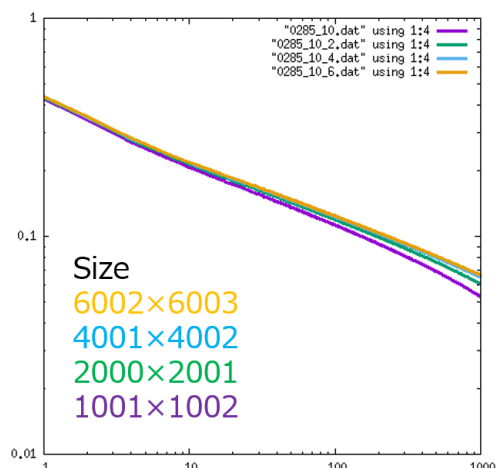
結果の図8.53より、オーバーリラクゼーションによる緩和の高速化が確認された。しかしここでオーバーリラクゼーションを取り入れたことによるサイズ依存性への影響を調べなければならない。そこでオーバーリラクゼーションを10回に固定し、同温度でサイズごとに計算して調べた。

表8.12 計算条件

Size	Sample	Step	Temperature
1001×1002	864	100000	0.285

図8.54 100000step : κ_z 図8.55 100000step : $|\kappa|^2$

サイズ依存性が1000stepあたりからはやくも出始める結果となった。そこで計算範囲を1000stepまでにし、サイズ6000を加え再度計算を行った。

図8.56 1000step : κ_z 図8.57 1000step : $|\kappa|^2$

結局のところ緩和がはやくなる代わりにサイズ依存性もはやく出始めるため非平衡緩和法への使用は適切でないと結論付けた。なおこの課題は引き継がれ、本系を含む様々なモデルにおけるオーバーリラクゼーションの有用性がより詳細に調べられたことにより、決着が付けられた[28]。

GPGPU (General-purpose computing on graphics processing units)

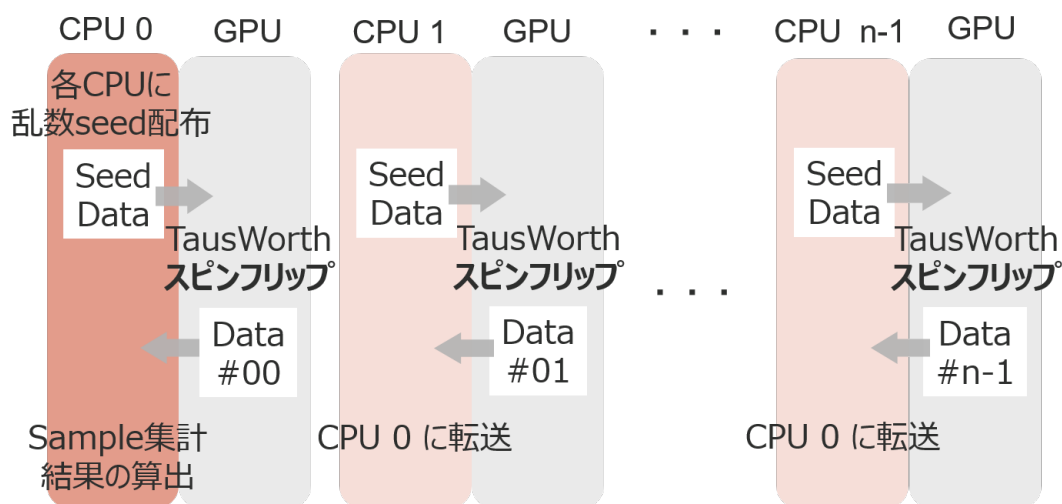


図8.58 GPGPU

GPU並列計算処理の実装が、非平衡緩和解析での計算時間の短縮に有効であることが先行研究により示されている[29]。先行研究ではIsing模型で約10倍、反強磁性三角格子XY模型において約35倍の計算速度の上昇が確認されている。そこで、本系においてもGPGPUが有効であるか調べ、その結果を表8.13にまとめた。

表8.13 GPGPU計算速度比較

Model	year	CPU[flip/sec]	GPU[flip/sec]
Ising[29]	2014	4.03E+07	4.23E+08
XY-AFT[29]	2014	1.23E+06	3.54E+08
Heisenberg-AFT	2017	5.07E+06	5.42E+07

結果より、本系においても約10倍の計算高速化に成功した。本研究では例えばゆらぎの解析のために膨大なサンプル数が必要であったりと、東大物性研を多用したため実際にGPU計算機をメインで用いることは無かったが、計算シミュレーションの場面によっては本系においても十分使用に値すると思われる結果となった。

謝辞

主任指導教員の尾関之康先生による手厚いご指導ご助言に深く感謝いたします。研究室における3年間で様々なことを学ぶことができ、大きく成長することができた実感しています。そのご恩を修論発表会における最優秀発表賞（目黒会賞）受賞という形で返すことができ、感無量です。

そして、指導教員の大淵康司先生をはじめ、一緒に研究生生活を過ごした、矢野君、矢島さん、安德君、崎浦君、尾崎さん、村山君、近君、中川君、中村さん、家子君、大坪さんにもお世話になりました。普段の研究室ではもちろんのこと、定例会の飲み会をはじめ高尾山からヨーロッパまで、研究以外においても楽しい時を過ごせたことを感謝いたします。特に矢島さんは自分にとって唯一の研究室の先輩であり、わからないところを丁寧に教えてくださったことを感謝いたします。

また、OBの恵知中さん、松田さんともお会いでき、様々なお話ができたことを感謝いたします。研究室外部におきましては、特に、東京大学特任講師である大久保毅さんには、ディスカッションや談話会などで研究を進める上での様々な見解をいただいたことを感謝いたします。また学会におきましてはNIMSの野々村禎彦さんにもお世話になったことを感謝いたします。

参考文献

- [1] Y. Ozeki and N. Ito: J. Phys. **40**, R149-R203 (2007)
- [2] 日経サイエンス: ”2016年ノーベル物理学賞：物質の「トポロジカル相」を理論的に発見した米国の3氏に”, <http://www.nikkei-science.com/?p=51294> (2016)
- [3] 日本物理学会: ”トポロジカル相転移および物質のトポロジカル相の理論的発見”, <http://www.jps.or.jp/information/2016/10/2016david-j-thoulessf-duncan-m-haldanej-michael-kosterlitz3.php> (2016)
- [4] H. Kawamura and S. Miyasita: J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 4138 (1984)
- [5] H. Kawamura, A. Yamamoto, and T. Okubo: J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 023701 (2010)
- [6] N. Kawashima and T. Okubo: 日本物理学会 16aAK-4 (2016)
- [7] S. Nakatsuji, Y. Nambu, H. Tonomura, O. Sakai, S. Jomas, C. Broholm, H. Tsunetsugu, Y. Qiu, and Y. Maeno: Science **309**, 1697 (2005)
- [8] H. Takeya, K. Ishida, K. Kitagawa, Y. Ihara, K. Onuma, Y. Maeno, Y. Nambu, S. Nakatsuji, D. E. MacLaughlin, A. Koda, and R. Kadono: Phys. Rev. B **77**, 054429 (2008)
- [9] A. Yaouanc, P. de Reotier, Y. Chapuis, C. Marin, G. Lapertot, A. Cervellino, and A. Amato: Phys. Rev. B **77**, 092403 (2008)
- [10] D. E. MacLaughlin, Y. Nambu, S. Nakatsuji, R. H. Heffner, L. Shu, O. O. Bernal, and K. Ishida: Phys. Rev. B **78**, 220403 (2008)
- [11] H. Yamaguchi, S. Kimura, M. Hagiwara, Y. Nambu, S. Nakatsuji, Y. Maeno, and K. Kindo: Phys. Rev. B **78**, 180404 (2008)
- [12] Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Maesato, and G. Saito: Phys. Rev. Lett. **91**, 107001 (2003)
- [13] A. Olariu, P. Mendelse, F. Bert, B. G. Ueland, P. Schiffer, R. F. Berger, and R.

- J. Cava: Phys. Rev. Lett. **97**, 167203 (2006)
- [14] D. Hsieh, D. Qian, R. F. Berger, R. J. Cava, J. W. Lynn, Q. Huang, and M. Z. Hasan: Physica B **403**, 1341 (2008)
- [15] T. Itou, A. Oyamada, S. Maegawa, M. Tamura, and R. Kato: Phys. Rev. B **77**, 104413 (2008)
- [16] H. Kawamura: Journal of Physics: Conference Series **320** 012002 (2011)
- [17] 東京大学 物性研究所: <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/joint.html>
- [18] Y. Echinaka and Y. Ozeki: Phys. Rev. E **94**, 043312 (2016)
- [19] 恵知中 悠貴: 修士論文 (2015)
- [20] Y. Yazima and Y. Ozeki: 論文投稿中
- [21] 矢島 優里: 修士論文 (2018)
- [22] J. A. Olive, A. P. Young and D. Sherrington: Phys. Rev. B **34**, 6341 (1986)
- [23] T. Okubo: private communication (2018)
- [24] T. Obuchi and H. Kawamura: J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 054003 (2012)
- [25] Y. Ozeki, A. Matsuda, and Y. Echinaka: Phys. Rev. E **99**, 012116 (2019)
- [26] Y. Ozeki, S. Yotsuyanagi and T. Sakai, Y. Echinaka: Phys. Rev. E **89**, 022122 (2014)
- [27] M. Creutz: Phys. Rev. D **36**, 515 (1987)
- [28] 安徳 俊一郎: 卒業論文 (2018)
- [29] 馬場 圭一郎: 卒業論文 (2015)